```
data_lach14

_publ_section_comment
;
One of the HOOCCH2CH2 chains on the cluster is disordered over two
sites (C1-C3 and O38-O39).
The atoms in one of the NBu4 cations have large U values, this is due
to disorder of the cation,
although this disorder was not investigated.
Squeeze was carried out on the structure to allow for disordered
solvent in the voids.
;

_audit_creation_method            SHELXL-97
_chemical_name_systematic
;
 ?
;
_chemical_name_common             (NBu4)3Na[SiW9O34(HOOC(CH2)2PO)3]
_chemical_melting_point           ?
_chemical_formula_moiety          ?
_chemical_formula_sum
 'C57 H123 N3 Na O43 P3 Si W9'
_chemical_formula_weight          3337.22

loop_
 _atom_type_symbol
 _atom_type_description
 _atom_type_scat_dispersion_real
 _atom_type_scat_dispersion_imag
 _atom_type_scat_source
 'C'  'C'   0.0181   0.0091
 'International Tables Vol C Tables 4.2.6.8 and 6.1.1.4'
 'H'  'H'   0.0000   0.0000
 'International Tables Vol C Tables 4.2.6.8 and 6.1.1.4'
 'N'  'N'   0.0311   0.0180
 'International Tables Vol C Tables 4.2.6.8 and 6.1.1.4'
 'O'  'O'   0.0492   0.0322
 'International Tables Vol C Tables 4.2.6.8 and 6.1.1.4'
 'Si'  'Si'   0.2541   0.3302
 'International Tables Vol C Tables 4.2.6.8 and 6.1.1.4'
 'P'  'P'   0.2955   0.4335
 'International Tables Vol C Tables 4.2.6.8 and 6.1.1.4'
 'W'  'W'  -5.4734   5.5774
 'International Tables Vol C Tables 4.2.6.8 and 6.1.1.4'
 'Na'  'Na'   0.1353   0.1239
 'International Tables Vol C Tables 4.2.6.8 and 6.1.1.4'

_symmetry_cell_setting            Tetragonal
_symmetry_space_group_name_H-M    'P4/n'

loop_
 _symmetry_equiv_pos_as_xyz
 'x, y, z'
 '-x+1/2, -y+1/2, z'
 '-y+1/2, x, z'
 'y, -x+1/2, z'
 '-x, -y, -z'
 'x-1/2, y-1/2, -z'
 'y-1/2, -x, -z'
 '-y, x-1/2, -z'

_cell_length_a                    38.9645(14)
_cell_length_b                    38.9645(14)
_cell_length_c                    14.1781(7)
```

```
_cell_angle_alpha                  90.00
_cell_angle_beta                   90.00
_cell_angle_gamma                  90.00
_cell_volume                       21525.7(15)
_cell_formula_units_Z              8
_cell_measurement_temperature      293(2)
_cell_measurement_reflns_used      ?
_cell_measurement_theta_min        2.3
_cell_measurement_theta_max        56.2

_exptl_crystal_description         ?
_exptl_crystal_colour              Colourless
_exptl_crystal_size_max            0.08
_exptl_crystal_size_mid            0.06
_exptl_crystal_size_min            0.06
_exptl_crystal_density_meas        ?
_exptl_crystal_density_diffrn      2.060
_exptl_crystal_density_method      'not measured'
_exptl_crystal_F_000               12528
_exptl_absorpt_coefficient_mu      18.443
_exptl_absorpt_correction_type     Multi-scan
_exptl_absorpt_correction_T_min    0.3201
_exptl_absorpt_correction_T_max    0.4041
_exptl_absorpt_process_details     'Sadabs'

_exptl_special_details
;
 ?
;

_diffrn_ambient_temperature        293(2)
_diffrn_radiation_wavelength       1.54178
_diffrn_radiation_type             CuK\a
_diffrn_radiation_source           'fine-focus sealed tube'
_diffrn_radiation_monochromator    graphite
_diffrn_measurement_device_type    'Bruker Smart 6000 CCD'
_diffrn_measurement_method         'CCD scans'
_diffrn_detector_area_resol_mean   ?
_diffrn_standards_number           ?
_diffrn_standards_interval_count   ?
_diffrn_standards_interval_time    ?
_diffrn_standards_decay_%          ?
_diffrn_reflns_number              134814
_diffrn_reflns_av_R_equivalents    0.1020
_diffrn_reflns_av_sigmaI/netI      0.0593
_diffrn_reflns_limit_h_min         -41
_diffrn_reflns_limit_h_max         41
_diffrn_reflns_limit_k_min         -40
_diffrn_reflns_limit_k_max         40
_diffrn_reflns_limit_l_min         -15
_diffrn_reflns_limit_l_max         14
_diffrn_reflns_theta_min           2.27
_diffrn_reflns_theta_max           56.21
_reflns_number_total               13975
_reflns_number_gt                  8349
_reflns_threshold_expression       >2sigma(I)

_computing_data_collection         SMART
_computing_cell_refinement         SAINTPLUS
_computing_data_reduction          SAINTPLUS
_computing_structure_solution      SHELXTL
_computing_structure_refinement    'SHELXL-97 (Sheldrick, 1997)'

_refine_special_details
;
 Refinement of F^2^ against ALL reflections.  The weighted R-factor
```

```
wR and
 goodness of fit S are based on F^2^, conventional R-factors R are
based
 on F, with F set to zero for negative F^2^. The threshold expression
of
 F^2^ > 2sigma(F^2^) is used only for calculating R-factors(gt) etc.
and is
 not relevant to the choice of reflections for refinement.  R-factors
based
 on F^2^ are statistically about twice as large as those based on F,
and R-
 factors based on ALL data will be even larger.
;

_refine_ls_structure_factor_coef  Fsqd
_refine_ls_matrix_type            fullcycle
_refine_ls_weighting_scheme       calc
_refine_ls_weighting_details
 'calc w=1/[\s^2^(Fo^2^)+(0.1049P)^2^+769.6738P] where P=(Fo^2^+2Fc^2
^)/3'
_atom_sites_solution_primary      direct
_atom_sites_solution_secondary    difmap
_atom_sites_solution_hydrogens    geom
_refine_ls_hydrogen_treatment     constr
_refine_ls_extinction_method      none
_refine_ls_extinction_coef        ?
_refine_ls_number_reflns          13975
_refine_ls_number_parameters      867
_refine_ls_number_restraints      987
_refine_ls_R_factor_all           0.1498
_refine_ls_R_factor_gt            0.0904
_refine_ls_wR_factor_ref          0.2786
_refine_ls_wR_factor_gt           0.2285
_refine_ls_goodness_of_fit_ref    1.040
_refine_ls_restrained_S_all       1.028
_refine_ls_shift/su_max           0.033
_refine_ls_shift/su_mean          0.003

loop_
 _atom_site_label
 _atom_site_type_symbol
 _atom_site_fract_x
 _atom_site_fract_y
 _atom_site_fract_z
 _atom_site_U_iso_or_equiv
 _atom_site_adp_type
 _atom_site_occupancy
 _atom_site_symmetry_multiplicity
 _atom_site_calc_flag
 _atom_site_refinement_flags
 _atom_site_disorder_assembly
 _atom_site_disorder_group
C1A C 0.9022(10) 0.0372(10) 0.082(3) 0.142(19) Uiso 0.56(2) 1 d PU .
.
H1A1 H 0.8984 0.0332 0.0149 0.170 Uiso 0.56(2) 1 calc PR . .
H1A2 H 0.9139 0.0591 0.0881 0.170 Uiso 0.56(2) 1 calc PR . .
P1 P 0.8617(2) 0.0392(3) 0.1411(8) 0.129(2) Uani 1 1 d U . .
C1B C 0.9022(10) 0.0372(10) 0.082(3) 0.14(2) Uiso 0.44(2) 1 d PU . .
H1B1 H 0.9008 0.0496 0.0223 0.168 Uiso 0.44(2) 1 calc PR . .
H1B2 H 0.9198 0.0480 0.1201 0.168 Uiso 0.44(2) 1 calc PR . .
C2A C 0.9258(13) 0.0078(15) 0.123(4) 0.111(14) Uiso 0.56(2) 1 d PDU .
.
H2A1 H 0.9256 0.0083 0.1911 0.133 Uiso 0.56(2) 1 calc PR . .
H2A2 H 0.9179 -0.0145 0.1016 0.133 Uiso 0.56(2) 1 calc PR . .
C2B C 0.9132(14) -0.0048(18) 0.060(6) 0.104(18) Uiso 0.44(2) 1 d PDU
. .
```

H2B1 H 0.9089 -0.0192 0.1149 0.125 Uiso 0.44(2) 1 calc PR . .
H2B2 H 0.9010 -0.0140 0.0063 0.125 Uiso 0.44(2) 1 calc PR . .
C3A C 0.9627(15) 0.0154(14) 0.084(4) 0.132(17) Uiso 0.56(2) 1 d PDU .
.
C3B C 0.9525(14) -0.0014(13) 0.040(6) 0.103(16) Uiso 0.44(2) 1 d PDU
. .
O38A O 0.9607(11) 0.0176(11) -0.026(3) 0.120(13) Uiso 0.56(2) 1 d PDU
. .
O38B O 0.9713(13) 0.0334(12) 0.022(4) 0.123(16) Uiso 0.44(2) 1 d PDU
. .
O39A O 0.9762(10) -0.0198(10) 0.093(3) 0.117(13) Uiso 0.56(2) 1 d PDU
. .
O39B O 0.9627(18) -0.0377(15) 0.023(5) 0.17(2) Uiso 0.44(2) 1 d PDU .
.
O10 O 0.6894(4) 0.0443(5) 0.2140(14) 0.115(4) Uani 1 1 d DU . .
O13 O 0.7240(5) 0.0137(5) 0.0838(13) 0.113(4) Uani 1 1 d DU . .
P3 P 0.7080(2) 0.0499(3) 0.1156(7) 0.122(3) Uani 1 1 d DU . .
C7 C 0.6742(9) 0.0592(8) 0.034(2) 0.140(12) Uiso 1 1 d DU . .
H7A H 0.6828 0.0567 -0.0300 0.168 Uiso 1 1 calc R . .
H7B H 0.6558 0.0427 0.0423 0.168 Uiso 1 1 calc R . .
C8 C 0.6597(9) 0.0951(8) 0.046(3) 0.153(13) Uiso 1 1 d DU . .
H8A H 0.6782 0.1117 0.0406 0.184 Uiso 1 1 calc R . .
H8B H 0.6497 0.0973 0.1081 0.184 Uiso 1 1 calc R . .
C9 C 0.6316(10) 0.1036(11) -0.030(3) 0.151(13) Uiso 1 1 d DU . .
O42 O 0.6213(7) 0.1357(7) -0.014(2) 0.163(10) Uiso 1 1 d DU . .
O43 O 0.6229(8) 0.0799(7) -0.088(2) 0.173(10) Uiso 1 1 d DU . .
O4 O 0.8092(5) 0.0824(6) 0.4802(17) 0.140(8) Uiso 1 1 d DU . .
O7 O 0.7433(5) 0.0828(6) 0.4765(18) 0.143(8) Uiso 1 1 d DU . .
P2 P 0.7769(3) 0.1057(3) 0.4506(10) 0.154(3) Uani 1 1 d DU . .
C4 C 0.7782(10) 0.1412(11) 0.530(4) 0.26(3) Uiso 1 1 d DU . .
H4A H 0.7883 0.1335 0.5889 0.311 Uiso 1 1 calc R . .
H4B H 0.7933 0.1585 0.5037 0.311 Uiso 1 1 calc R . .
C5 C 0.7442(13) 0.1579(15) 0.552(5) 0.36(3) Uiso 1 1 d DU . .
H5A H 0.7295 0.1416 0.5843 0.429 Uiso 1 1 calc R . .
H5B H 0.7330 0.1643 0.4934 0.429 Uiso 1 1 calc R . .
C6 C 0.7491(18) 0.1909(17) 0.616(5) 0.42(3) Uiso 1 1 d DU . .
O40 O 0.7187(17) 0.2072(16) 0.610(6) 0.49(4) Uiso 1 1 d DU . .
O41 O 0.7731(17) 0.1906(17) 0.678(5) 0.43(4) Uiso 1 1 d DU . .
N1 N 0.9182(8) 0.1044(8) 0.461(2) 0.231(10) Uani 1 1 d DU . .
C10 C 0.9169(11) 0.1302(12) 0.540(3) 0.234(12) Uani 1 1 d DU . .
H10A H 0.9236 0.1524 0.5154 0.281 Uiso 1 1 calc R . .
H10B H 0.9339 0.1237 0.5873 0.281 Uiso 1 1 calc R . .
C11 C 0.8821(13) 0.1342(14) 0.590(4) 0.273(16) Uani 1 1 d DU . .
H11A H 0.8640 0.1367 0.5436 0.328 Uiso 1 1 calc R . .
H11B H 0.8773 0.1140 0.6276 0.328 Uiso 1 1 calc R . .
C12 C 0.8832(13) 0.1658(14) 0.653(5) 0.28(2) Uiso 1 1 d DU . .
H12A H 0.8875 0.1860 0.6151 0.342 Uiso 1 1 calc R . .
H12B H 0.9020 0.1635 0.6979 0.342 Uiso 1 1 calc R . .
C13 C 0.8495(17) 0.171(2) 0.708(5) 0.40(5) Uiso 1 1 d DU . .
H13A H 0.8521 0.1891 0.7522 0.601 Uiso 1 1 calc R . .
H13B H 0.8440 0.1500 0.7409 0.601 Uiso 1 1 calc R . .
H13C H 0.8314 0.1762 0.6644 0.601 Uiso 1 1 calc R . .
C14 C 0.8899(11) 0.1105(10) 0.388(3) 0.236(13) Uani 1 1 d DU . .
H14A H 0.8682 0.1052 0.4185 0.283 Uiso 1 1 calc R . .
H14B H 0.8931 0.0934 0.3388 0.283 Uiso 1 1 calc R . .
C15 C 0.8854(14) 0.1453(12) 0.339(4) 0.262(16) Uani 1 1 d DU . .
H15A H 0.8855 0.1627 0.3874 0.314 Uiso 1 1 calc R . .
H15B H 0.9057 0.1490 0.3004 0.314 Uiso 1 1 calc R . .
C16 C 0.8571(15) 0.1518(12) 0.281(5) 0.27(2) Uiso 1 1 d DU . .
H16A H 0.8363 0.1514 0.3187 0.327 Uiso 1 1 calc R . .
H16B H 0.8554 0.1342 0.2330 0.327 Uiso 1 1 calc R . .
C17 C 0.8616(17) 0.1876(14) 0.235(5) 0.31(3) Uiso 1 1 d DU . .
H17A H 0.8417 0.1929 0.1979 0.470 Uiso 1 1 calc R . .
H17B H 0.8815 0.1873 0.1948 0.470 Uiso 1 1 calc R . .
H17C H 0.8645 0.2046 0.2830 0.470 Uiso 1 1 calc R . .
C18 C 0.9532(10) 0.1108(11) 0.417(3) 0.246(13) Uani 1 1 d DU . .

H18A H 0.9714 0.1089 0.4631 0.295 Uiso 1 1 calc R . .
H18B H 0.9542 0.1334 0.3881 0.295 Uiso 1 1 calc R . .
C19 C 0.9564(12) 0.0812(14) 0.338(4) 0.276(17) Uani 1 1 d DU . .
H19A H 0.9568 0.0585 0.3657 0.331 Uiso 1 1 calc R . .
H19B H 0.9380 0.0825 0.2918 0.331 Uiso 1 1 calc R . .
C20 C 0.9917(13) 0.0909(16) 0.294(5) 0.33(2) Uiso 1 1 d DU . .
H20A H 1.0098 0.0883 0.3403 0.391 Uiso 1 1 calc R . .
H20B H 0.9914 0.1145 0.2725 0.391 Uiso 1 1 calc R . .
C21 C 0.998(2) 0.066(2) 0.209(5) 0.48(5) Uiso 1 1 d DU . .
H21A H 1.0196 0.0714 0.1802 0.720 Uiso 1 1 calc R . .
H21B H 0.9799 0.0690 0.1634 0.720 Uiso 1 1 calc R . .
H21C H 0.9981 0.0429 0.2309 0.720 Uiso 1 1 calc R . .
C22 C 0.9151(11) 0.0667(9) 0.489(4) 0.249(13) Uani 1 1 d DU . .
H22A H 0.9133 0.0524 0.4333 0.298 Uiso 1 1 calc R . .
H22B H 0.8947 0.0631 0.5275 0.298 Uiso 1 1 calc R . .
C23 C 0.9475(13) 0.0575(11) 0.545(5) 0.272(16) Uani 1 1 d DU . .
H23A H 0.9517 0.0740 0.5954 0.327 Uiso 1 1 calc R . .
H23B H 0.9675 0.0565 0.5048 0.327 Uiso 1 1 calc R . .
C24 C 0.9388(13) 0.0216(14) 0.586(5) 0.31(2) Uiso 1 1 d DU . .
H24A H 0.9265 0.0079 0.5402 0.368 Uiso 1 1 calc R . .
H24B H 0.9247 0.0238 0.6423 0.368 Uiso 1 1 calc R . .
C25 C 0.9738(17) 0.0044(17) 0.611(6) 0.366 Uiso 1 1 d DU . .
H25A H 0.9699 -0.0151 0.6509 0.549 Uiso 1 1 calc R . .
H25B H 0.9881 0.0207 0.6434 0.549 Uiso 1 1 calc R . .
H25C H 0.9850 -0.0028 0.5540 0.549 Uiso 1 1 calc R . .
N2 N 0.7831(10) -0.0269(10) -0.174(3) 0.358(8) Uani 1 1 d DU . .
C26 C 0.7862(18) 0.0049(11) -0.113(4) 0.344(12) Uani 1 1 d DU . .
H26A H 0.8062 0.0021 -0.0729 0.412 Uiso 1 1 calc R . .
H26B H 0.7662 0.0059 -0.0724 0.412 Uiso 1 1 calc R . .
C27 C 0.789(2) 0.0392(12) -0.164(4) 0.335(16) Uani 1 1 d DU . .
H27A H 0.8098 0.0391 -0.2033 0.402 Uiso 1 1 calc R . .
H27B H 0.7697 0.0425 -0.2049 0.402 Uiso 1 1 calc R . .
C28 C 0.791(2) 0.0685(13) -0.094(4) 0.32(2) Uiso 1 1 d DU . .
H28A H 0.8124 0.0662 -0.0580 0.381 Uiso 1 1 calc R . .
H28B H 0.7723 0.0668 -0.0509 0.381 Uiso 1 1 calc R . .
C29 C 0.7910(19) 0.1041(13) -0.140(5) 0.31(3) Uiso 1 1 d DU . .
H29A H 0.7914 0.1214 -0.0922 0.467 Uiso 1 1 calc R . .
H29B H 0.7704 0.1065 -0.1772 0.467 Uiso 1 1 calc R . .
H29C H 0.8107 0.1066 -0.1803 0.467 Uiso 1 1 calc R . .
C30 C 0.7529(11) -0.0251(17) -0.243(4) 0.369(13) Uani 1 1 d DU . .
H30A H 0.7550 -0.0033 -0.2750 0.443 Uiso 1 1 calc R . .
H30B H 0.7571 -0.0427 -0.2897 0.443 Uiso 1 1 calc R . .
C31 C 0.7151(12) -0.0285(15) -0.215(6) 0.374(16) Uani 1 1 d DU . .
H31A H 0.7044 -0.0440 -0.2597 0.449 Uiso 1 1 calc R . .
H31B H 0.7142 -0.0396 -0.1538 0.449 Uiso 1 1 calc R . .
C32 C 0.6951(14) 0.0010(17) -0.210(8) 0.39(2) Uiso 1 1 d DU . .
H32A H 0.6967 0.0137 -0.2690 0.474 Uiso 1 1 calc R . .
H32B H 0.7029 0.0156 -0.1594 0.474 Uiso 1 1 calc R . .
C33 C 0.6574(15) -0.010(2) -0.193(9) 0.52(6) Uiso 1 1 d DU . .
H33A H 0.6427 0.0095 -0.1937 0.777 Uiso 1 1 calc R . .
H33B H 0.6557 -0.0214 -0.1326 0.777 Uiso 1 1 calc R . .
H33C H 0.6504 -0.0259 -0.2415 0.777 Uiso 1 1 calc R . .
C38 C 0.7758(18) -0.0552(11) -0.101(3) 0.367(13) Uani 1 1 d DU . .
H38A H 0.7529 -0.0530 -0.0748 0.440 Uiso 1 1 calc R . .
H38B H 0.7926 -0.0551 -0.0507 0.440 Uiso 1 1 calc R . .
C39 C 0.779(2) -0.0907(12) -0.170(5) 0.409(19) Uani 1 1 d DU . .
H39A H 0.7729 -0.0864 -0.2352 0.490 Uiso 1 1 calc R . .
H39B H 0.8023 -0.1006 -0.1681 0.490 Uiso 1 1 calc R . .
C40 C 0.7526(16) -0.1129(16) -0.117(7) 0.45(3) Uiso 1 1 d DU . .
H40A H 0.7415 -0.1285 -0.1608 0.538 Uiso 1 1 calc R . .
H40B H 0.7352 -0.0982 -0.0898 0.538 Uiso 1 1 calc R . .
C41 C 0.771(3) -0.134(3) -0.037(7) 0.54(6) Uiso 1 1 d DU . .
H41A H 0.7535 -0.1462 -0.0011 0.811 Uiso 1 1 calc R . .
H41B H 0.7828 -0.1187 0.0042 0.811 Uiso 1 1 calc R . .
H41C H 0.7863 -0.1502 -0.0642 0.811 Uiso 1 1 calc R . .
C34 C 0.8143(11) -0.0368(17) -0.232(4) 0.364(9) Uani 1 1 d DU . .

H34A H 0.8129 -0.0265 -0.2946 0.437 Uiso 1 1 calc R . .
H34B H 0.8155 -0.0615 -0.2398 0.437 Uiso 1 1 calc R . .
C35 C 0.8460(13) -0.024(2) -0.180(5) 0.369(15) Uani 1 1 d DU . .
H35A H 0.8467 -0.0333 -0.1166 0.443 Uiso 1 1 calc R . .
H35B H 0.8451 0.0012 -0.1743 0.443 Uiso 1 1 calc R . .
N3 N 0.8787(16) -0.1447(16) 0.203(4) 0.730(16) Uani 1 1 d DU . .
C42 C 0.891(3) -0.1150(18) 0.261(6) 0.722(18) Uani 1 1 d DU . .
H42A H 0.8733 -0.0981 0.2651 0.867 Uiso 1 1 calc R . .
H42B H 0.9105 -0.1045 0.2280 0.867 Uiso 1 1 calc R . .
C43 C 0.903(4) -0.123(3) 0.362(6) 0.71(2) Uani 1 1 d DU . .
H43A H 0.8836 -0.1244 0.4037 0.856 Uiso 1 1 calc R . .
H43B H 0.9147 -0.1454 0.3631 0.856 Uiso 1 1 calc R . .
C44 C 0.928(4) -0.096(3) 0.397(7) 0.70(3) Uiso 1 1 d DU . .
H44A H 0.9174 -0.0735 0.3870 0.837 Uiso 1 1 calc R . .
H44B H 0.9486 -0.0966 0.3589 0.837 Uiso 1 1 calc R . .
C45 C 0.938(3) -0.099(3) 0.501(6) 0.61(7) Uiso 1 1 d DU . .
H45A H 0.9516 -0.0804 0.5191 0.921 Uiso 1 1 calc R . .
H45B H 0.9500 -0.1204 0.5096 0.921 Uiso 1 1 calc R . .
H45C H 0.9171 -0.0998 0.5383 0.921 Uiso 1 1 calc R . .
C46 C 0.8848(19) -0.141(3) 0.098(5) 0.728(18) Uani 1 1 d DU . .
H46A H 0.8714 -0.1210 0.0793 0.873 Uiso 1 1 calc R . .
H46B H 0.8738 -0.1605 0.0694 0.873 Uiso 1 1 calc R . .
C47 C 0.919(2) -0.137(3) 0.047(6) 0.73(2) Uani 1 1 d DU . .
H47A H 0.9338 -0.1551 0.0696 0.871 Uiso 1 1 calc R . .
H47B H 0.9145 -0.1419 -0.0194 0.871 Uiso 1 1 calc R . .
C48 C 0.937(3) -0.107(3) 0.050(8) 0.72(3) Uiso 1 1 d DU . .
H48A H 0.9227 -0.0875 0.0339 0.865 Uiso 1 1 calc R . .
H48B H 0.9561 -0.1075 0.0046 0.865 Uiso 1 1 calc R . .
C49 C 0.952(5) -0.102(4) 0.151(10) 0.75(7) Uiso 1 1 d DU . .
H49A H 0.9760 -0.0952 0.1468 1.127 Uiso 1 1 calc R . .
H49B H 0.9502 -0.1227 0.1856 1.127 Uiso 1 1 calc R . .
H49C H 0.9397 -0.0839 0.1826 1.127 Uiso 1 1 calc R . .
C50 C 0.8396(16) -0.145(2) 0.217(7) 0.735(17) Uani 1 1 d DU . .
H50A H 0.8299 -0.1220 0.2137 0.882 Uiso 1 1 calc R . .
H50B H 0.8330 -0.1558 0.2756 0.882 Uiso 1 1 calc R . .
C51 C 0.828(2) -0.169(3) 0.124(6) 0.74(2) Uani 1 1 d DU . .
H51A H 0.8045 -0.1646 0.1057 0.893 Uiso 1 1 calc R . .
H51B H 0.8431 -0.1647 0.0701 0.893 Uiso 1 1 calc R . .
C52 C 0.834(3) -0.205(2) 0.168(10) 0.76(3) Uiso 1 1 d DU . .
H52A H 0.8544 -0.2048 0.2054 0.917 Uiso 1 1 calc R . .
H52B H 0.8358 -0.2217 0.1187 0.917 Uiso 1 1 calc R . .
C53 C 0.802(4) -0.214(5) 0.232(11) 0.85(8) Uiso 1 1 d DU . .
H53A H 0.8088 -0.2124 0.2975 1.274 Uiso 1 1 calc R . .
H53B H 0.7943 -0.2365 0.2183 1.274 Uiso 1 1 calc R . .
H53C H 0.7838 -0.1976 0.2209 1.274 Uiso 1 1 calc R . .
C54 C 0.892(2) -0.1798(19) 0.234(6) 0.730(18) Uani 1 1 d DU . .
H54A H 0.9162 -0.1821 0.2215 0.876 Uiso 1 1 calc R . .
H54B H 0.8796 -0.1981 0.2024 0.876 Uiso 1 1 calc R . .
C55 C 0.885(2) -0.181(3) 0.342(6) 0.73(2) Uani 1 1 d DU . .
H55A H 0.8971 -0.1625 0.3735 0.879 Uiso 1 1 calc R . .
H55B H 0.8920 -0.2026 0.3682 0.879 Uiso 1 1 calc R . .
C56 C 0.846(2) -0.176(5) 0.351(7) 0.73(3) Uiso 1 1 d DU . .
H56A H 0.8338 -0.1913 0.3078 0.870 Uiso 1 1 calc R . .
H56B H 0.8394 -0.1525 0.3352 0.870 Uiso 1 1 calc R . .
C57 C 0.836(3) -0.184(5) 0.455(9) 0.75(7) Uiso 1 1 d DU . .
H57A H 0.8508 -0.1723 0.4967 1.123 Uiso 1 1 calc R . .
H57B H 0.8374 -0.2085 0.4652 1.123 Uiso 1 1 calc R . .
H57C H 0.8124 -0.1770 0.4659 1.123 Uiso 1 1 calc R . .
O1 O 0.8695(4) 0.0340(5) 0.2467(16) 0.112(4) Uani 1 1 d U . .
O2 O 0.9059(4) -0.0062(6) 0.3691(18) 0.123(6) Uani 1 1 d U . .
O3 O 0.8467(4) 0.0276(4) 0.4232(13) 0.090(4) Uani 1 1 d U . .
O5 O 0.8420(7) 0.0446(7) 0.6157(18) 0.160(8) Uani 1 1 d U . .
O6 O 0.7725(6) 0.0424(7) 0.5871(16) 0.147(7) Uani 1 1 d U . .
O8 O 0.7031(7) 0.0530(9) 0.5929(18) 0.186(10) Uani 1 1 d U . .
O9 O 0.7045(4) 0.0367(5) 0.4047(14) 0.098(4) Uani 1 1 d U . .
O11 O 0.6445(5) 0.0109(7) 0.327(2) 0.153(6) Uani 1 1 d U . .

```
O12 O 0.6879(4) -0.0234(6) 0.2023(15) 0.112(3) Uani 1 1 d U . .
O14 O 0.7168(7) -0.0518(7) 0.0453(18) 0.154(6) Uani 1 1 d U . .
O15 O 0.7778(4) -0.0261(5) 0.1150(11) 0.089(4) Uani 1 1 d U . .
O16 O 0.8396(5) 0.0094(6) 0.1047(14) 0.116(4) Uani 1 1 d U . .
O17 O 0.8386(6) -0.0593(7) 0.0654(15) 0.143(6) Uani 1 1 d U . .
O18 O 0.8637(4) -0.0339(5) 0.2290(13) 0.094(3) Uani 1 1 d U . .
O19 O 0.8110(3) -0.0014(4) 0.2771(10) 0.059(3) Uani 1 1 d U . .
O20 O 0.7748(4) 0.0289(4) 0.4130(11) 0.071(3) Uani 1 1 d U . .
O21 O 0.7425(3) 0.0030(4) 0.2636(11) 0.064(3) Uani 1 1 d U . .
O22 O 0.8457(4) -0.0393(4) 0.4120(12) 0.082(3) Uani 1 1 d U . .
O23 O 0.8113(5) -0.0153(5) 0.5405(12) 0.100(4) Uani 1 1 d DU . .
O24 O 0.7296(4) -0.0167(6) 0.5250(12) 0.105(3) Uani 1 1 d DU . .
O25 O 0.6970(4) -0.0303(5) 0.3851(14) 0.102(4) Uani 1 1 d U . .
O26 O 0.7408(5) -0.0677(4) 0.2225(14) 0.097(4) Uani 1 1 d U . .
O27 O 0.8062(4) -0.0713(4) 0.2347(12) 0.085(3) Uani 1 1 d U . .
O28 O 0.7717(4) -0.0364(4) 0.3880(10) 0.068(2) Uani 1 1 d U . .
O29 O 0.8023(5) -0.0943(5) 0.4090(15) 0.104(4) Uani 1 1 d U . .
O30 O 0.8342(6) -0.0769(7) 0.5782(16) 0.145(6) Uani 1 1 d U . .
O31 O 0.7658(5) -0.0649(6) 0.5485(14) 0.122(4) Uani 1 1 d U . .
O32 O 0.6953(6) -0.0711(7) 0.5477(19) 0.164(7) Uani 1 1 d U . .
O33 O 0.7339(5) -0.0911(5) 0.3982(18) 0.125(4) Uani 1 1 d U . .
O34 O 0.7692(6) -0.1309(5) 0.274(2) 0.149(6) Uani 1 1 d U . .
O35 O 0.8450(6) 0.0732(7) 0.122(2) 0.153(6) Uani 1 1 d U . .
O36 O 0.7813(7) 0.1184(6) 0.359(2) 0.156(6) Uani 1 1 d U . .
O37 O 0.7343(6) 0.0769(7) 0.120(2) 0.145(5) Uani 1 1 d U . .
Si1 Si 0.77516(13) 0.00074(15) 0.3321(4) 0.0490(12) Uani 1 1 d U . .
W1 W 0.86344(3) -0.00459(3) 0.33714(10) 0.0817(4) Uani 1 1 d U . .
W2 W 0.81496(4) 0.03591(5) 0.52481(12) 0.1141(6) Uani 1 1 d DU . .
W3 W 0.73190(4) 0.04060(5) 0.51272(12) 0.1187(6) Uani 1 1 d DU . .
W4 W 0.68759(3) 0.00718(4) 0.30864(12) 0.0999(5) Uani 1 1 d U . .
W5 W 0.73054(4) -0.03051(4) 0.14137(11) 0.0996(5) Uani 1 1 d U . .
W6 W 0.82307(3) -0.03587(4) 0.15646(9) 0.0912(4) Uani 1 1 d U . .
W7 W 0.81072(4) -0.05712(4) 0.49631(10) 0.0976(5) Uani 1 1 d DU . .
W8 W 0.72535(4) -0.05263(5) 0.47956(13) 0.1151(6) Uani 1 1 d DU . .
W9 W 0.77064(4) -0.08918(3) 0.31134(13) 0.0996(5) Uani 1 1 d U . .
Na1 Na 0.7871(4) 0.0803(6) 0.2103(15) 0.185(6) Uani 1 1 d U . .
C36 C 0.8786(14) -0.034(2) -0.235(5) 0.38(2) Uiso 1 1 d DU . .
H36A H 0.8750 -0.0563 -0.2670 0.453 Uiso 1 1 calc R . .
H36B H 0.8845 -0.0173 -0.2822 0.453 Uiso 1 1 calc R . .
C37 C 0.9071(17) -0.037(3) -0.159(6) 0.44(5) Uiso 1 1 d DU . .
H37A H 0.9248 -0.0526 -0.1815 0.655 Uiso 1 1 calc R . .
H37B H 0.8974 -0.0464 -0.1022 0.655 Uiso 1 1 calc R . .
H37C H 0.9167 -0.0152 -0.1475 0.655 Uiso 1 1 calc R . .

loop_
 _atom_site_aniso_label
 _atom_site_aniso_U_11
 _atom_site_aniso_U_22
 _atom_site_aniso_U_33
 _atom_site_aniso_U_23
 _atom_site_aniso_U_13
 _atom_site_aniso_U_12
P1 0.077(4) 0.162(5) 0.147(6) 0.064(5) 0.048(4) 0.000(3)
O10 0.076(9) 0.131(8) 0.139(8) 0.016(7) -0.019(7) 0.036(7)
O13 0.087(10) 0.156(5) 0.095(8) 0.011(6) -0.025(7) 0.016(7)
P3 0.087(5) 0.148(6) 0.132(6) 0.034(6) -0.032(4) 0.029(4)
P2 0.166(9) 0.097(5) 0.201(6) -0.049(5) 0.007(7) 0.026(5)
N1 0.239(19) 0.221(18) 0.23(2) 0.013(15) -0.009(14) -0.074(18)
C10 0.24(2) 0.23(2) 0.24(2) 0.01(2) -0.018(19) -0.08(3)
C11 0.26(2) 0.28(3) 0.27(2) 0.00(2) 0.00(2) -0.02(2)
C14 0.24(2) 0.24(2) 0.23(3) 0.00(2) -0.01(2) -0.06(3)
C15 0.27(3) 0.26(2) 0.26(2) 0.01(2) -0.01(2) -0.02(2)
C18 0.238(19) 0.25(3) 0.25(3) 0.04(2) 0.000(19) -0.05(2)
C19 0.26(2) 0.29(3) 0.28(3) 0.02(2) 0.01(2) -0.01(2)
C22 0.26(3) 0.219(18) 0.27(3) 0.013(19) -0.01(2) -0.07(2)
C23 0.28(3) 0.26(2) 0.28(3) 0.01(2) -0.02(2) -0.02(2)
```

```
N2 0.361(8) 0.366(14) 0.346(18) 0.011(12) 0.007(11) 0.002(17)
C26 0.34(2) 0.358(17) 0.33(2) 0.020(14) 0.004(19) 0.01(2)
C27 0.33(3) 0.357(16) 0.32(3) 0.019(19) 0.00(2) 0.02(2)
C30 0.368(11) 0.38(3) 0.36(2) 0.00(2) -0.006(16) 0.00(2)
C31 0.368(11) 0.39(3) 0.37(3) 0.01(2) 0.00(2) 0.00(2)
C38 0.37(3) 0.365(19) 0.37(2) 0.019(16) 0.003(17) -0.01(3)
C39 0.43(4) 0.373(9) 0.42(3) -0.004(16) 0.01(3) -0.02(3)
C34 0.368(10) 0.37(2) 0.36(2) -0.005(14) 0.012(12) 0.003(16)
C35 0.362(10) 0.38(3) 0.36(3) -0.01(2) 0.011(19) 0.01(2)
N3 0.732(19) 0.73(2) 0.729(19) -0.003(14) 0.002(14) 0.009(17)
C42 0.72(3) 0.72(2) 0.72(2) 0.005(19) 0.00(2) 0.01(2)
C43 0.71(3) 0.71(3) 0.72(2) 0.01(2) 0.01(2) 0.01(2)
C46 0.73(3) 0.72(3) 0.728(19) -0.003(16) -0.001(18) 0.01(2)
C47 0.73(3) 0.72(3) 0.72(3) 0.00(2) 0.00(2) 0.00(2)
C50 0.733(19) 0.73(2) 0.74(2) -0.001(15) 0.002(14) 0.000(14)
C51 0.75(2) 0.74(3) 0.74(3) -0.005(15) -0.003(16) -0.003(16)
C54 0.74(2) 0.72(2) 0.73(2) 0.001(14) 0.001(16) 0.000(15)
C55 0.74(3) 0.73(3) 0.73(2) 0.000(15) 0.001(16) 0.000(17)
O1 0.069(8) 0.120(9) 0.147(7) 0.036(7) 0.020(8) -0.031(7)
O2 0.052(6) 0.142(16) 0.175(18) 0.007(10) -0.020(8) -0.006(7)
O3 0.062(7) 0.094(8) 0.115(8) -0.013(7) -0.019(6) -0.029(7)
O5 0.149(12) 0.201(18) 0.131(12) -0.067(17) -0.054(11) 0.012(16)
O6 0.132(7) 0.208(16) 0.102(10) -0.086(16) -0.008(6) 0.023(9)
O8 0.151(12) 0.28(2) 0.125(13) -0.045(19) 0.049(11) 0.08(2)
O9 0.059(7) 0.116(9) 0.118(7) -0.008(7) 0.020(6) 0.018(8)
O11 0.047(6) 0.18(2) 0.23(2) -0.006(11) 0.011(8) 0.003(7)
O12 0.063(6) 0.138(8) 0.135(8) -0.004(6) -0.027(6) -0.013(6)
O14 0.148(13) 0.182(11) 0.131(11) -0.058(10) -0.064(11) 0.012(15)
O15 0.096(5) 0.114(12) 0.056(8) -0.008(7) -0.001(5) 0.019(6)
O16 0.091(10) 0.177(7) 0.081(9) 0.042(6) 0.034(7) 0.015(6)
O17 0.126(14) 0.211(13) 0.092(10) -0.043(10) 0.026(9) 0.059(13)
O18 0.069(7) 0.115(10) 0.098(8) 0.004(6) 0.013(6) 0.024(6)
O19 0.045(5) 0.072(7) 0.060(6) 0.006(5) 0.009(4) -0.005(5)
O20 0.062(6) 0.074(7) 0.076(7) -0.015(6) 0.009(4) 0.002(6)
O21 0.048(5) 0.069(7) 0.075(6) 0.005(5) -0.005(4) 0.004(5)
O22 0.068(7) 0.092(8) 0.088(9) 0.011(6) -0.007(6) 0.008(7)
O23 0.093(11) 0.152(6) 0.055(9) 0.013(6) -0.006(6) -0.003(7)
O24 0.071(9) 0.175(6) 0.069(8) 0.027(6) 0.033(6) -0.013(6)
O25 0.062(7) 0.124(9) 0.120(9) 0.012(7) 0.020(7) -0.023(7)
O26 0.087(8) 0.079(7) 0.124(10) -0.023(6) -0.016(7) -0.018(7)
O27 0.088(8) 0.078(7) 0.089(9) -0.022(6) -0.005(6) 0.017(6)
O28 0.063(6) 0.077(5) 0.063(6) 0.012(4) 0.008(4) -0.002(5)
O29 0.102(9) 0.081(7) 0.130(9) 0.034(6) -0.001(7) 0.001(6)
O30 0.137(11) 0.187(14) 0.110(12) 0.067(10) -0.024(10) 0.015(14)
O31 0.118(6) 0.153(12) 0.096(9) 0.060(8) 0.024(6) -0.012(7)
O32 0.121(10) 0.202(18) 0.168(17) 0.068(12) 0.049(11) -0.044(14)
O33 0.097(9) 0.103(8) 0.174(11) 0.035(7) 0.011(8) -0.025(7)
O34 0.143(18) 0.077(7) 0.23(2) -0.015(9) -0.024(11) -0.008(8)
O35 0.113(9) 0.168(8) 0.177(14) 0.076(11) 0.032(10) 0.008(9)
O36 0.152(17) 0.088(13) 0.229(9) -0.020(8) 0.004(12) 0.003(12)
O37 0.109(7) 0.148(10) 0.177(15) 0.034(12) -0.004(9) 0.015(7)
Si1 0.039(3) 0.058(3) 0.050(3) 0.001(2) 0.008(2) 0.004(2)
W1 0.0466(6) 0.0940(9) 0.1044(10) 0.0050(7) -0.0003(6) -0.0019(6)
W2 0.1003(11) 0.1377(13) 0.1042(11) -0.0522(10) -0.0244(9) 0.0125(9)
W3 0.0950(10) 0.1593(15) 0.1018(11) -0.0404(10) 0.0211(8) 0.0328(10)
W4 0.0466(7) 0.1284(12) 0.1249(12) 0.0036(9) 0.0034(7) 0.0097(7)
W5 0.0828(9) 0.1204(11) 0.0956(10) -0.0202(8) -0.0283(8) 0.0076(8)
W6 0.0776(8) 0.1237(11) 0.0725(8) -0.0145(8) 0.0170(7) 0.0225(7)
W7 0.0918(9) 0.1202(11) 0.0807(9) 0.0329(8) -0.0036(7) 0.0085(8)
W8 0.0858(10) 0.1426(13) 0.1170(12) 0.0406(10) 0.0307(9) -0.0141(9)
W9 0.0850(9) 0.0691(8) 0.1449(13) 0.0066(8) -0.0090(9) -0.0076(7)
Na1 0.106(6) 0.242(14) 0.206(10) -0.050(10) 0.005(7) 0.024(7)

_geom_special_details
;
 All esds (except the esd in the dihedral angle between two l.s.
```

planes)
 are estimated using the full covariance matrix. The cell esds are taken
 into account individually in the estimation of esds in distances, angles
 and torsion angles; correlations between esds in cell parameters are only
 used when they are defined by crystal symmetry. An approximate (isotropic)
 treatment of cell esds is used for estimating esds involving l.s. planes.
;

```
loop_
 _geom_bond_atom_site_label_1
 _geom_bond_atom_site_label_2
 _geom_bond_distance
 _geom_bond_site_symmetry_2
 _geom_bond_publ_flag
C1A C2A 1.58(6) . ?
C1A P1 1.79(4) . ?
C1A H1A1 0.9700 . ?
C1A H1A2 0.9700 . ?
P1 O35 1.50(3) . ?
P1 O16 1.54(2) . ?
P1 O1 1.54(2) . ?
P1 Na1 3.459(18) . ?
C2A C3A 1.57(4) . ?
C2A H2A1 0.9700 . ?
C2A H2A2 0.9700 . ?
C2B C3B 1.56(4) . ?
C2B H2B1 0.9700 . ?
C2B H2B2 0.9700 . ?
C3A O38B 1.17(6) . ?
C3A O39A 1.47(4) . ?
C3B O38A 1.23(7) . ?
C3B O39B 1.49(4) . ?
O10 P3 1.587(19) . ?
O10 W4 1.97(2) . ?
O13 P3 1.608(19) . ?
O13 W5 1.92(2) . ?
P3 O37 1.47(3) . ?
P3 C7 1.79(3) . ?
C7 C8 1.518(18) . ?
C7 H7A 0.9700 . ?
C7 H7B 0.9700 . ?
C8 C9 1.568(19) . ?
C8 H8A 0.9700 . ?
C8 H8B 0.9700 . ?
C9 O43 1.28(4) . ?
C9 O42 1.34(4) . ?
O4 P2 1.61(2) . ?
O4 W2 1.93(2) . ?
O7 P2 1.62(2) . ?
O7 W3 1.78(2) . ?
P2 O36 1.41(3) . ?
P2 C4 1.79(3) . ?
C4 C5 1.51(3) . ?
C4 H4A 0.9700 . ?
C4 H4B 0.9700 . ?
C5 C6 1.59(3) . ?
C5 H5A 0.9700 . ?
C5 H5B 0.9700 . ?
C6 O41 1.28(4) . ?
C6 O40 1.35(4) . ?
N1 C10 1.51(3) . ?
```

```
N1 C22 1.526(18) . ?
N1 C18 1.527(18) . ?
N1 C14 1.534(18) . ?
C10 C11 1.53(4) . ?
C10 H10A 0.9700 . ?
C10 H10B 0.9700 . ?
C11 C12 1.524(19) . ?
C11 H11A 0.9700 . ?
C11 H11B 0.9700 . ?
C12 C13 1.533(19) . ?
C12 H12A 0.9700 . ?
C12 H12B 0.9700 . ?
C13 H13A 0.9600 . ?
C13 H13B 0.9600 . ?
C13 H13C 0.9600 . ?
C14 C15 1.536(18) . ?
C14 H14A 0.9700 . ?
C14 H14B 0.9700 . ?
C15 C16 1.39(5) . ?
C15 H15A 0.9700 . ?
C15 H15B 0.9700 . ?
C16 C17 1.553(18) . ?
C16 H16A 0.9700 . ?
C16 H16B 0.9700 . ?
C17 H17A 0.9600 . ?
C17 H17B 0.9600 . ?
C17 H17C 0.9600 . ?
C18 C19 1.612(18) . ?
C18 H18A 0.9700 . ?
C18 H18B 0.9700 . ?
C19 C20 1.554(18) . ?
C19 H19A 0.9700 . ?
C19 H19B 0.9700 . ?
C20 C21 1.561(19) . ?
C20 H20A 0.9700 . ?
C20 H20B 0.9700 . ?
C21 H21A 0.9600 . ?
C21 H21B 0.9600 . ?
C21 H21C 0.9600 . ?
C22 C23 1.538(18) . ?
C22 H22A 0.9700 . ?
C22 H22B 0.9700 . ?
C23 C24 1.55(2) . ?
C23 H23A 0.9700 . ?
C23 H23B 0.9700 . ?
C24 C25 1.56(3) . ?
C24 H24A 0.9700 . ?
C24 H24B 0.9700 . ?
C25 H25A 0.9600 . ?
C25 H25B 0.9600 . ?
C25 H25C 0.9600 . ?
N2 C26 1.51(3) . ?
N2 C34 1.52(2) . ?
N2 C30 1.53(2) . ?
N2 C38 1.53(3) . ?
C26 C27 1.53(4) . ?
C26 H26A 0.9700 . ?
C26 H26B 0.9700 . ?
C27 C28 1.51(3) . ?
C27 H27A 0.9700 . ?
C27 H27B 0.9700 . ?
C28 C29 1.53(3) . ?
C28 H28A 0.9700 . ?
C28 H28B 0.9700 . ?
C29 H29A 0.9600 . ?
C29 H29B 0.9600 . ?
```

```
C29 H29C 0.9600 . ?
C30 C31 1.53(2) . ?
C30 H30A 0.9700 . ?
C30 H30B 0.9700 . ?
C31 C32 1.39(5) . ?
C31 H31A 0.9700 . ?
C31 H31B 0.9700 . ?
C32 C33 1.55(2) . ?
C32 H32A 0.9700 . ?
C32 H32B 0.9700 . ?
C33 H33A 0.9600 . ?
C33 H33B 0.9600 . ?
C33 H33C 0.9600 . ?
C38 C39 1.70(2) . ?
C38 H38A 0.9700 . ?
C38 H38B 0.9700 . ?
C39 C40 1.55(2) . ?
C39 H39A 0.9700 . ?
C39 H39B 0.9700 . ?
C40 C41 1.57(3) . ?
C40 H40A 0.9700 . ?
C40 H40B 0.9700 . ?
C41 H41A 0.9600 . ?
C41 H41B 0.9600 . ?
C41 H41C 0.9600 . ?
C34 C35 1.53(2) . ?
C34 H34A 0.9700 . ?
C34 H34B 0.9700 . ?
C35 C36 1.55(4) . ?
C35 H35A 0.9700 . ?
C35 H35B 0.9700 . ?
N3 C42 1.50(3) . ?
N3 C46 1.52(2) . ?
N3 C54 1.53(2) . ?
N3 C50 1.54(3) . ?
C42 C43 1.54(4) . ?
C42 H42A 0.9700 . ?
C42 H42B 0.9700 . ?
C43 C44 1.52(3) . ?
C43 H43A 0.9700 . ?
C43 H43B 0.9700 . ?
C44 C45 1.53(3) . ?
C44 H44A 0.9700 . ?
C44 H44B 0.9700 . ?
C45 H45A 0.9600 . ?
C45 H45B 0.9600 . ?
C45 H45C 0.9600 . ?
C46 C47 1.52(3) . ?
C46 H46A 0.9700 . ?
C46 H46B 0.9700 . ?
C47 C48 1.39(5) . ?
C47 H47A 0.9700 . ?
C47 H47B 0.9700 . ?
C48 C49 1.55(2) . ?
C48 H48A 0.9700 . ?
C48 H48B 0.9700 . ?
C49 H49A 0.9600 . ?
C49 H49B 0.9600 . ?
C49 H49C 0.9600 . ?
C50 C51 1.66(2) . ?
C50 H50A 0.9700 . ?
C50 H50B 0.9700 . ?
C51 C52 1.56(3) . ?
C51 H51A 0.9700 . ?
C51 H51B 0.9700 . ?
C52 C53 1.57(2) . ?
```

```
C52 H52A 0.9700 . ?
C52 H52B 0.9700 . ?
C53 H53A 0.9600 . ?
C53 H53B 0.9600 . ?
C53 H53C 0.9600 . ?
C54 C55 1.54(3) . ?
C54 H54A 0.9700 . ?
C54 H54B 0.9700 . ?
C55 C56 1.55(3) . ?
C55 H55A 0.9700 . ?
C55 H55B 0.9700 . ?
C56 C57 1.56(3) . ?
C56 H56A 0.9700 . ?
C56 H56B 0.9700 . ?
C57 H57A 0.9600 . ?
C57 H57B 0.9600 . ?
C57 H57C 0.9600 . ?
O1 W1 1.989(19) . ?
O2 W1 1.718(17) . ?
O3 W1 1.868(18) . ?
O3 W2 1.926(19) . ?
O5 W2 1.70(2) . ?
O6 W2 1.89(2) . ?
O6 W3 1.90(2) . ?
O8 W3 1.67(2) . ?
O9 W3 1.87(2) . ?
O9 W4 1.90(2) . ?
O11 W4 1.705(18) . ?
O12 W5 1.89(2) . ?
O12 W4 1.92(2) . ?
O14 W5 1.68(2) . ?
O15 W5 1.887(18) . ?
O15 W6 1.897(17) . ?
O16 W6 2.02(2) . ?
O17 W6 1.694(19) . ?
O18 W6 1.890(18) . ?
O18 W1 1.912(19) . ?
O19 Si1 1.602(14) . ?
O19 W1 2.216(13) . ?
O19 W6 2.225(14) . ?
O20 Si1 1.586(16) . ?
O20 W3 2.237(14) . ?
O20 W2 2.245(15) . ?
O21 Si1 1.605(15) . ?
O21 W5 2.220(15) . ?
O21 W4 2.237(14) . ?
O22 W1 1.853(17) . ?
O22 W7 1.940(17) . ?
O23 W7 1.74(2) . ?
O23 W2 2.01(2) . ?
O24 W8 1.55(2) . ?
O24 W3 2.24(2) . ?
O25 W4 1.85(2) . ?
O25 W8 1.94(2) . ?
O26 W5 1.89(2) . ?
O26 W9 1.906(19) . ?
O27 W6 1.891(18) . ?
O27 W9 1.892(18) . ?
O28 Si1 1.654(16) . ?
O28 W7 2.306(15) . ?
O28 W8 2.314(14) . ?
O28 W9 2.327(16) . ?
O29 W9 1.87(2) . ?
O29 W7 1.93(2) . ?
O30 W7 1.67(2) . ?
O31 W8 1.91(2) . ?
```

```
O31 W7 1.926(19) . ?
O32 W8 1.68(2) . ?
O33 W9 1.89(2) . ?
O33 W8 1.92(2) . ?
O34 W9 1.71(2) . ?
O35 Na1 2.59(3) . ?
O36 Na1 2.58(3) . ?
O37 Na1 2.43(3) . ?
C36 C37 1.55(5) . ?
C36 H36A 0.9700 . ?
C36 H36B 0.9700 . ?
C37 H37A 0.9600 . ?
C37 H37B 0.9600 . ?
C37 H37C 0.9600 . ?

loop_
 _geom_angle_atom_site_label_1
 _geom_angle_atom_site_label_2
 _geom_angle_atom_site_label_3
 _geom_angle
 _geom_angle_site_symmetry_1
 _geom_angle_site_symmetry_3
 _geom_angle_publ_flag
C2A C1A P1 112(3) . . ?
C2A C1A H1A1 109.3 . . ?
P1 C1A H1A1 109.3 . . ?
C2A C1A H1A2 109.3 . . ?
P1 C1A H1A2 109.3 . . ?
H1A1 C1A H1A2 107.9 . . ?
O35 P1 O16 111.5(15) . . ?
O35 P1 O1 112.1(16) . . ?
O16 P1 O1 109.7(11) . . ?
O35 P1 C1A 109.6(16) . . ?
O16 P1 C1A 107.6(16) . . ?
O1 P1 C1A 106.1(16) . . ?
O35 P1 Na1 43.8(10) . . ?
O16 P1 Na1 88.6(9) . . ?
O1 P1 Na1 87.2(9) . . ?
C1A P1 Na1 153.3(14) . . ?
C3A C2A C1A 106(4) . . ?
C3A C2A H2A1 110.6 . . ?
C1A C2A H2A1 110.6 . . ?
C3A C2A H2A2 110.6 . . ?
C1A C2A H2A2 110.7 . . ?
H2A1 C2A H2A2 108.8 . . ?
C3B C2B H2B1 111.5 . . ?
C3B C2B H2B2 111.5 . . ?
H2B1 C2B H2B2 109.3 . . ?
O38B C3A O39A 121(5) . . ?
O38B C3A C2A 130(6) . . ?
O39A C3A C2A 97(4) . . ?
O38A C3B O39B 112(6) . . ?
O38A C3B C2B 116(6) . . ?
O39B C3B C2B 102(5) . . ?
P3 O10 W4 135.6(12) . . ?
P3 O13 W5 135.9(12) . . ?
O37 P3 O10 112.4(16) . . ?
O37 P3 O13 111.7(13) . . ?
O10 P3 O13 107.7(11) . . ?
O37 P3 C7 113.2(16) . . ?
O10 P3 C7 105.1(13) . . ?
O13 P3 C7 106.4(12) . . ?
C8 C7 P3 113(2) . . ?
C8 C7 H7A 109.0 . . ?
P3 C7 H7A 109.0 . . ?
C8 C7 H7B 109.0 . . ?
```

```
P3 C7 H7B 109.0 . . ?
H7A C7 H7B 107.8 . . ?
C7 C8 C9 112(3) . . ?
C7 C8 H8A 109.2 . . ?
C9 C8 H8A 109.2 . . ?
C7 C8 H8B 109.2 . . ?
C9 C8 H8B 109.2 . . ?
H8A C8 H8B 107.9 . . ?
O43 C9 O42 135(3) . . ?
O43 C9 C8 118(4) . . ?
O42 C9 C8 107(3) . . ?
P2 O4 W2 134.8(15) . . ?
P2 O7 W3 140.6(16) . . ?
O36 P2 O4 110.2(16) . . ?
O36 P2 O7 120.1(17) . . ?
O4 P2 O7 105.3(14) . . ?
O36 P2 C4 108(2) . . ?
O4 P2 C4 104.5(17) . . ?
O7 P2 C4 107.8(17) . . ?
C5 C4 P2 116(3) . . ?
C5 C4 H4A 108.2 . . ?
P2 C4 H4A 108.3 . . ?
C5 C4 H4B 108.3 . . ?
P2 C4 H4B 108.3 . . ?
H4A C4 H4B 107.4 . . ?
C4 C5 C6 111(4) . . ?
C4 C5 H5A 109.4 . . ?
C6 C5 H5A 109.4 . . ?
C4 C5 H5B 109.4 . . ?
C6 C5 H5B 109.4 . . ?
H5A C5 H5B 108.0 . . ?
O41 C6 O40 133(5) . . ?
O41 C6 C5 118(5) . . ?
O40 C6 C5 104(4) . . ?
C10 N1 C22 117(3) . . ?
C10 N1 C18 103(2) . . ?
C22 N1 C18 110(3) . . ?
C10 N1 C14 112(3) . . ?
C22 N1 C14 105(3) . . ?
C18 N1 C14 110(3) . . ?
N1 C10 C11 116(3) . . ?
N1 C10 H10A 108.3 . . ?
C11 C10 H10A 108.3 . . ?
N1 C10 H10B 108.3 . . ?
C11 C10 H10B 108.3 . . ?
H10A C10 H10B 107.4 . . ?
C12 C11 C10 109(4) . . ?
C12 C11 H11A 109.9 . . ?
C10 C11 H11A 109.9 . . ?
C12 C11 H11B 109.8 . . ?
C10 C11 H11B 109.8 . . ?
H11A C11 H11B 108.3 . . ?
C11 C12 C13 112(3) . . ?
C11 C12 H12A 109.2 . . ?
C13 C12 H12A 109.1 . . ?
C11 C12 H12B 109.2 . . ?
C13 C12 H12B 109.3 . . ?
H12A C12 H12B 107.9 . . ?
C12 C13 H13A 109.5 . . ?
C12 C13 H13B 109.4 . . ?
H13A C13 H13B 109.5 . . ?
C12 C13 H13C 109.5 . . ?
H13A C13 H13C 109.5 . . ?
H13B C13 H13C 109.5 . . ?
N1 C14 C15 122(3) . . ?
N1 C14 H14A 106.9 . . ?
```

```
C15 C14 H14A 106.8 . . ?
N1 C14 H14B 106.9 . . ?
C15 C14 H14B 106.9 . . ?
H14A C14 H14B 106.7 . . ?
C16 C15 C14 121(4) . . ?
C16 C15 H15A 107.0 . . ?
C14 C15 H15A 107.1 . . ?
C16 C15 H15B 107.1 . . ?
C14 C15 H15B 107.0 . . ?
H15A C15 H15B 106.8 . . ?
C15 C16 C17 109(4) . . ?
C15 C16 H16A 109.9 . . ?
C17 C16 H16A 109.9 . . ?
C15 C16 H16B 109.9 . . ?
C17 C16 H16B 109.9 . . ?
H16A C16 H16B 108.3 . . ?
C16 C17 H17A 109.5 . . ?
C16 C17 H17B 109.5 . . ?
H17A C17 H17B 109.5 . . ?
C16 C17 H17C 109.5 . . ?
H17A C17 H17C 109.5 . . ?
H17B C17 H17C 109.5 . . ?
N1 C18 C19 104(2) . . ?
N1 C18 H18A 110.9 . . ?
C19 C18 H18A 110.9 . . ?
N1 C18 H18B 111.0 . . ?
C19 C18 H18B 111.0 . . ?
H18A C18 H18B 109.0 . . ?
C20 C19 C18 100(2) . . ?
C20 C19 H19A 111.8 . . ?
C18 C19 H19A 111.8 . . ?
C20 C19 H19B 111.8 . . ?
C18 C19 H19B 111.8 . . ?
H19A C19 H19B 109.5 . . ?
C19 C20 C21 107(3) . . ?
C19 C20 H20A 110.2 . . ?
C21 C20 H20A 110.2 . . ?
C19 C20 H20B 110.3 . . ?
C21 C20 H20B 110.3 . . ?
H20A C20 H20B 108.5 . . ?
C20 C21 H21A 109.4 . . ?
C20 C21 H21B 109.5 . . ?
H21A C21 H21B 109.5 . . ?
C20 C21 H21C 109.5 . . ?
H21A C21 H21C 109.5 . . ?
H21B C21 H21C 109.5 . . ?
N1 C22 C23 107(3) . . ?
N1 C22 H22A 110.3 . . ?
C23 C22 H22A 110.3 . . ?
N1 C22 H22B 110.3 . . ?
C23 C22 H22B 110.3 . . ?
H22A C22 H22B 108.5 . . ?
C22 C23 C24 103(3) . . ?
C22 C23 H23A 111.2 . . ?
C24 C23 H23A 111.2 . . ?
C22 C23 H23B 111.2 . . ?
C24 C23 H23B 111.2 . . ?
H23A C23 H23B 109.1 . . ?
C23 C24 C25 106(3) . . ?
C23 C24 H24A 110.5 . . ?
C25 C24 H24A 110.5 . . ?
C23 C24 H24B 110.5 . . ?
C25 C24 H24B 110.5 . . ?
H24A C24 H24B 108.7 . . ?
C24 C25 H25A 109.5 . . ?
C24 C25 H25B 109.5 . . ?
```

```
H25A C25 H25B 109.5 . . ?
C24 C25 H25C 109.5 . . ?
H25A C25 H25C 109.5 . . ?
H25B C25 H25C 109.5 . . ?
C26 N2 C34 117(3) . . ?
C26 N2 C30 113(3) . . ?
C34 N2 C30 106(3) . . ?
C26 N2 C38 103(3) . . ?
C34 N2 C38 109(3) . . ?
C30 N2 C38 108(3) . . ?
N2 C26 C27 117(3) . . ?
N2 C26 H26A 108.0 . . ?
C27 C26 H26A 108.0 . . ?
N2 C26 H26B 108.0 . . ?
C27 C26 H26B 108.0 . . ?
H26A C26 H26B 107.2 . . ?
C28 C27 C26 111(4) . . ?
C28 C27 H27A 109.5 . . ?
C26 C27 H27A 109.5 . . ?
C28 C27 H27B 109.4 . . ?
C26 C27 H27B 109.4 . . ?
H27A C27 H27B 108.0 . . ?
C27 C28 C29 114(4) . . ?
C27 C28 H28A 108.8 . . ?
C29 C28 H28A 108.8 . . ?
C27 C28 H28B 108.8 . . ?
C29 C28 H28B 108.8 . . ?
H28A C28 H28B 107.7 . . ?
C28 C29 H29A 109.5 . . ?
C28 C29 H29B 109.5 . . ?
H29A C29 H29B 109.5 . . ?
C28 C29 H29C 109.5 . . ?
H29A C29 H29C 109.5 . . ?
H29B C29 H29C 109.5 . . ?
C31 C30 N2 125(4) . . ?
C31 C30 H30A 106.1 . . ?
N2 C30 H30A 106.1 . . ?
C31 C30 H30B 106.1 . . ?
N2 C30 H30B 106.2 . . ?
H30A C30 H30B 106.3 . . ?
C32 C31 C30 119(4) . . ?
C32 C31 H31A 107.6 . . ?
C30 C31 H31A 107.6 . . ?
C32 C31 H31B 107.6 . . ?
C30 C31 H31B 107.6 . . ?
H31A C31 H31B 107.1 . . ?
C31 C32 C33 108(4) . . ?
C31 C32 H32A 110.1 . . ?
C33 C32 H32A 110.1 . . ?
C31 C32 H32B 110.2 . . ?
C33 C32 H32B 110.2 . . ?
H32A C32 H32B 108.5 . . ?
C32 C33 H33A 109.5 . . ?
C32 C33 H33B 109.4 . . ?
H33A C33 H33B 109.5 . . ?
C32 C33 H33C 109.5 . . ?
H33A C33 H33C 109.5 . . ?
H33B C33 H33C 109.5 . . ?
N2 C38 C39 101(3) . . ?
N2 C38 H38A 111.7 . . ?
C39 C38 H38A 111.7 . . ?
N2 C38 H38B 111.6 . . ?
C39 C38 H38B 111.7 . . ?
H38A C38 H38B 109.4 . . ?
C40 C39 C38 97(3) . . ?
C40 C39 H39A 112.3 . . ?
```

```
C38 C39 H39A 112.4 . . ?
C40 C39 H39B 112.5 . . ?
C38 C39 H39B 112.4 . . ?
H39A C39 H39B 110.0 . . ?
C39 C40 C41 110(4) . . ?
C39 C40 H40A 109.6 . . ?
C41 C40 H40A 109.6 . . ?
C39 C40 H40B 109.6 . . ?
C41 C40 H40B 109.6 . . ?
H40A C40 H40B 108.1 . . ?
C40 C41 H41A 109.5 . . ?
C40 C41 H41B 109.4 . . ?
H41A C41 H41B 109.5 . . ?
C40 C41 H41C 109.5 . . ?
H41A C41 H41C 109.5 . . ?
H41B C41 H41C 109.5 . . ?
N2 C34 C35 107(3) . . ?
N2 C34 H34A 110.4 . . ?
C35 C34 H34A 110.4 . . ?
N2 C34 H34B 110.3 . . ?
C35 C34 H34B 110.3 . . ?
H34A C34 H34B 108.6 . . ?
C34 C35 C36 109(4) . . ?
C34 C35 H35A 110.1 . . ?
C36 C35 H35A 110.0 . . ?
C34 C35 H35B 109.9 . . ?
C36 C35 H35B 109.9 . . ?
H35A C35 H35B 108.4 . . ?
C42 N3 C46 114(3) . . ?
C42 N3 C54 115(3) . . ?
C46 N3 C54 109(3) . . ?
C42 N3 C50 106(3) . . ?
C46 N3 C50 106(3) . . ?
C54 N3 C50 107(3) . . ?
N3 C42 C43 117(4) . . ?
N3 C42 H42A 108.0 . . ?
C43 C42 H42A 107.9 . . ?
N3 C42 H42B 108.3 . . ?
C43 C42 H42B 108.3 . . ?
H42A C42 H42B 107.3 . . ?
C44 C43 C42 110(4) . . ?
C44 C43 H43A 109.6 . . ?
C42 C43 H43A 109.9 . . ?
C44 C43 H43B 109.7 . . ?
C42 C43 H43B 109.5 . . ?
H43A C43 H43B 108.2 . . ?
C43 C44 C45 114(4) . . ?
C43 C44 H44A 108.9 . . ?
C45 C44 H44A 108.9 . . ?
C43 C44 H44B 108.8 . . ?
C45 C44 H44B 108.8 . . ?
H44A C44 H44B 107.7 . . ?
C44 C45 H45A 109.4 . . ?
C44 C45 H45B 109.5 . . ?
H45A C45 H45B 109.5 . . ?
C44 C45 H45C 109.4 . . ?
H45A C45 H45C 109.5 . . ?
H45B C45 H45C 109.5 . . ?
N3 C46 C47 128(4) . . ?
N3 C46 H46A 105.1 . . ?
C47 C46 H46A 105.0 . . ?
N3 C46 H46B 105.5 . . ?
C47 C46 H46B 105.4 . . ?
H46A C46 H46B 106.0 . . ?
C48 C47 C46 121(5) . . ?
C48 C47 H47A 107.1 . . ?
```

```
C46 C47 H47A 106.7 . . ?
C48 C47 H47B 107.0 . . ?
C46 C47 H47B 107.0 . . ?
H47A C47 H47B 106.7 . . ?
C47 C48 C49 109(4) . . ?
C47 C48 H48A 109.9 . . ?
C49 C48 H48A 110.0 . . ?
C47 C48 H48B 109.7 . . ?
C49 C48 H48B 109.6 . . ?
H48A C48 H48B 108.2 . . ?
C48 C49 H49A 109.7 . . ?
C48 C49 H49B 109.5 . . ?
H49A C49 H49B 109.5 . . ?
C48 C49 H49C 109.2 . . ?
H49A C49 H49C 109.5 . . ?
H49B C49 H49C 109.5 . . ?
N3 C50 C51 100(2) . . ?
N3 C50 H50A 112.1 . . ?
C51 C50 H50A 111.6 . . ?
N3 C50 H50B 111.6 . . ?
C51 C50 H50B 111.9 . . ?
H50A C50 H50B 109.5 . . ?
C52 C51 C50 98(2) . . ?
C52 C51 H51A 112.4 . . ?
C50 C51 H51A 112.2 . . ?
C52 C51 H51B 111.7 . . ?
C50 C51 H51B 112.1 . . ?
H51A C51 H51B 109.7 . . ?
C51 C52 C53 110(4) . . ?
C51 C52 H52A 109.9 . . ?
C53 C52 H52A 109.7 . . ?
C51 C52 H52B 110.0 . . ?
C53 C52 H52B 109.5 . . ?
H52A C52 H52B 108.2 . . ?
C52 C53 H53A 109.4 . . ?
C52 C53 H53B 109.8 . . ?
H53A C53 H53B 109.5 . . ?
C52 C53 H53C 109.2 . . ?
H53A C53 H53C 109.5 . . ?
H53B C53 H53C 109.5 . . ?
N3 C54 C55 104(3) . . ?
N3 C54 H54A 110.6 . . ?
C55 C54 H54A 111.0 . . ?
N3 C54 H54B 111.0 . . ?
C55 C54 H54B 111.0 . . ?
H54A C54 H54B 108.9 . . ?
C54 C55 C56 105(3) . . ?
C54 C55 H55A 111.0 . . ?
C56 C55 H55A 111.1 . . ?
C54 C55 H55B 110.6 . . ?
C56 C55 H55B 110.6 . . ?
H55A C55 H55B 108.9 . . ?
C55 C56 C57 108(4) . . ?
C55 C56 H56A 110.4 . . ?
C57 C56 H56A 110.2 . . ?
C55 C56 H56B 109.9 . . ?
C57 C56 H56B 110.1 . . ?
H56A C56 H56B 108.5 . . ?
C56 C57 H57A 109.5 . . ?
C56 C57 H57B 109.4 . . ?
H57A C57 H57B 109.5 . . ?
C56 C57 H57C 109.5 . . ?
H57A C57 H57C 109.5 . . ?
H57B C57 H57C 109.5 . . ?
P1 O1 W1 134.6(14) . . ?
W1 O3 W2 145.6(9) . . ?
```

```
W2 O6 W3 117.6(11) . . ?
W3 O9 W4 146.4(11) . . ?
W5 O12 W4 117.1(9) . . ?
W5 O15 W6 145.9(10) . . ?
P1 O16 W6 135.9(13) . . ?
W6 O18 W1 117.1(8) . . ?
Si1 O19 W1 128.3(8) . . ?
Si1 O19 W6 126.1(8) . . ?
W1 O19 W6 93.8(5) . . ?
Si1 O20 W3 127.2(8) . . ?
Si1 O20 W2 126.1(8) . . ?
W3 O20 W2 92.8(6) . . ?
Si1 O21 W5 127.3(8) . . ?
Si1 O21 W4 126.2(9) . . ?
W5 O21 W4 93.8(5) . . ?
W1 O22 W7 151.2(9) . . ?
W7 O23 W2 152.5(10) . . ?
W8 O24 W3 150.6(11) . . ?
W4 O25 W8 150.3(10) . . ?
W5 O26 W9 150.0(9) . . ?
W6 O27 W9 149.4(9) . . ?
Si1 O28 W7 124.9(8) . . ?
Si1 O28 W8 124.8(8) . . ?
W7 O28 W8 92.6(5) . . ?
Si1 O28 W9 123.4(8) . . ?
W7 O28 W9 90.7(5) . . ?
W8 O28 W9 90.3(5) . . ?
W9 O29 W7 120.4(9) . . ?
W8 O31 W7 120.8(9) . . ?
W9 O33 W8 119.4(10) . . ?
P1 O35 Na1 112.6(13) . . ?
P2 O36 Na1 124.2(14) . . ?
P3 O37 Na1 130.5(15) . . ?
O20 Si1 O19 113.3(8) . . ?
O20 Si1 O21 113.1(8) . . ?
O19 Si1 O21 113.6(8) . . ?
O20 Si1 O28 104.9(9) . . ?
O19 Si1 O28 105.0(8) . . ?
O21 Si1 O28 106.0(8) . . ?
O2 W1 O22 100.6(9) . . ?
O2 W1 O3 100.8(9) . . ?
O22 W1 O3 89.2(8) . . ?
O2 W1 O18 100.6(10) . . ?
O22 W1 O18 91.5(8) . . ?
O3 W1 O18 158.0(7) . . ?
O2 W1 O1 94.7(9) . . ?
O22 W1 O1 164.7(7) . . ?
O3 W1 O1 87.4(9) . . ?
O18 W1 O1 86.2(9) . . ?
O2 W1 O19 172.6(9) . . ?
O22 W1 O19 85.2(6) . . ?
O3 W1 O19 83.8(6) . . ?
O18 W1 O19 74.4(6) . . ?
O1 W1 O19 79.6(6) . . ?
O5 W2 O6 99.3(11) . . ?
O5 W2 O3 101.7(11) . . ?
O6 W2 O3 159.0(8) . . ?
O5 W2 O4 97.7(12) . . ?
O6 W2 O4 85.8(11) . . ?
O3 W2 O4 89.2(9) . . ?
O5 W2 O23 99.0(11) . . ?
O6 W2 O23 91.1(10) . . ?
O3 W2 O23 87.8(7) . . ?
O4 W2 O23 163.3(8) . . ?
O5 W2 O20 173.1(10) . . ?
O6 W2 O20 74.8(7) . . ?
```

```
O3 W2 O20 84.2(6) . . ?
O4 W2 O20 78.6(8) . . ?
O23 W2 O20 84.7(6) . . ?
O8 W3 O7 95.6(15) . . ?
O8 W3 O9 101.3(11) . . ?
O7 W3 O9 88.9(10) . . ?
O8 W3 O6 99.9(12) . . ?
O7 W3 O6 85.4(12) . . ?
O9 W3 O6 158.5(8) . . ?
O8 W3 O20 173.0(13) . . ?
O7 W3 O20 79.7(9) . . ?
O9 W3 O20 83.8(6) . . ?
O6 W3 O20 74.7(7) . . ?
O8 W3 O24 102.0(13) . . ?
O7 W3 O24 162.4(9) . . ?
O9 W3 O24 87.7(8) . . ?
O6 W3 O24 91.5(10) . . ?
O20 W3 O24 82.8(6) . . ?
O11 W4 O25 99.8(11) . . ?
O11 W4 O9 100.2(11) . . ?
O25 W4 O9 89.3(9) . . ?
O11 W4 O12 100.5(11) . . ?
O25 W4 O12 88.2(9) . . ?
O9 W4 O12 159.3(7) . . ?
O11 W4 O10 94.6(11) . . ?
O25 W4 O10 165.2(7) . . ?
O9 W4 O10 91.8(9) . . ?
O12 W4 O10 85.5(9) . . ?
O11 W4 O21 172.4(11) . . ?
O25 W4 O21 85.5(6) . . ?
O9 W4 O21 85.3(6) . . ?
O12 W4 O21 74.0(6) . . ?
O10 W4 O21 79.9(6) . . ?
O14 W5 O15 101.3(11) . . ?
O14 W5 O12 99.3(11) . . ?
O15 W5 O12 159.0(8) . . ?
O14 W5 O26 100.4(11) . . ?
O15 W5 O26 89.0(8) . . ?
O12 W5 O26 91.2(9) . . ?
O14 W5 O13 93.3(11) . . ?
O15 W5 O13 87.9(8) . . ?
O12 W5 O13 87.0(9) . . ?
O26 W5 O13 166.4(8) . . ?
O14 W5 O21 171.5(9) . . ?
O15 W5 O21 84.1(6) . . ?
O12 W5 O21 75.0(7) . . ?
O26 W5 O21 86.2(6) . . ?
O13 W5 O21 80.3(7) . . ?
O17 W6 O18 97.9(10) . . ?
O17 W6 O27 100.3(11) . . ?
O18 W6 O27 90.2(8) . . ?
O17 W6 O15 101.8(9) . . ?
O18 W6 O15 159.9(7) . . ?
O27 W6 O15 90.2(8) . . ?
O17 W6 O16 94.6(11) . . ?
O18 W6 O16 83.9(8) . . ?
O27 W6 O16 164.7(8) . . ?
O15 W6 O16 90.5(8) . . ?
O17 W6 O19 170.8(10) . . ?
O18 W6 O19 74.6(6) . . ?
O27 W6 O19 85.2(6) . . ?
O15 W6 O19 85.5(6) . . ?
O16 W6 O19 79.6(7) . . ?
O30 W7 O23 100.1(11) . . ?
O30 W7 O31 99.2(10) . . ?
O23 W7 O31 91.2(10) . . ?
```

```
O30 W7 O29 101.0(11) . . ?
O23 W7 O29 158.7(8) . . ?
O31 W7 O29 88.5(9) . . ?
O30 W7 O22 102.1(10) . . ?
O23 W7 O22 83.0(8) . . ?
O31 W7 O22 158.7(8) . . ?
O29 W7 O22 89.6(8) . . ?
O30 W7 O28 170.8(10) . . ?
O23 W7 O28 85.4(7) . . ?
O31 W7 O28 73.3(7) . . ?
O29 W7 O28 74.1(7) . . ?
O22 W7 O28 85.8(6) . . ?
O24 W8 O32 102.9(12) . . ?
O24 W8 O31 85.7(10) . . ?
O32 W8 O31 100.0(11) . . ?
O24 W8 O33 159.4(8) . . ?
O32 W8 O33 97.6(12) . . ?
O31 W8 O33 88.2(10) . . ?
O24 W8 O25 86.7(9) . . ?
O32 W8 O25 101.1(11) . . ?
O31 W8 O25 158.8(7) . . ?
O33 W8 O25 92.0(9) . . ?
O24 W8 O28 84.4(7) . . ?
O32 W8 O28 169.9(11) . . ?
O31 W8 O28 73.3(6) . . ?
O33 W8 O28 75.0(7) . . ?
O25 W8 O28 86.2(6) . . ?
O34 W9 O29 98.7(11) . . ?
O34 W9 O33 98.0(11) . . ?
O29 W9 O33 90.7(10) . . ?
O34 W9 O27 101.2(11) . . ?
O29 W9 O27 89.0(8) . . ?
O33 W9 O27 160.6(8) . . ?
O34 W9 O26 100.9(10) . . ?
O29 W9 O26 160.2(7) . . ?
O33 W9 O26 89.3(9) . . ?
O27 W9 O26 84.6(8) . . ?
O34 W9 O28 170.3(11) . . ?
O29 W9 O28 74.7(7) . . ?
O33 W9 O28 75.2(7) . . ?
O27 W9 O28 86.0(6) . . ?
O26 W9 O28 86.1(6) . . ?
O37 Na1 O36 112.7(11) . . ?
O37 Na1 O35 118.5(12) . . ?
O36 Na1 O35 121.9(12) . . ?
O37 Na1 P1 122.5(10) . . ?
O36 Na1 P1 124.7(9) . . ?
O35 Na1 P1 23.6(6) . . ?
C37 C36 C35 105(4) . . ?
C37 C36 H36A 110.8 . . ?
C35 C36 H36A 110.8 . . ?
C37 C36 H36B 110.8 . . ?
C35 C36 H36B 110.9 . . ?
H36A C36 H36B 108.9 . . ?
C36 C37 H37A 109.5 . . ?
C36 C37 H37B 109.4 . . ?
H37A C37 H37B 109.5 . . ?
C36 C37 H37C 109.5 . . ?
H37A C37 H37C 109.5 . . ?
H37B C37 H37C 109.5 . . ?

loop_
 _geom_torsion_atom_site_label_1
 _geom_torsion_atom_site_label_2
 _geom_torsion_atom_site_label_3
 _geom_torsion_atom_site_label_4
```

```
 _geom_torsion
 _geom_torsion_site_symmetry_1
 _geom_torsion_site_symmetry_2
 _geom_torsion_site_symmetry_3
 _geom_torsion_site_symmetry_4
 _geom_torsion_publ_flag
C2A C1A P1 O35 162(3) . . . . ?
C2A C1A P1 O16 -76(4) . . . . ?
C2A C1A P1 O1 41(4) . . . . ?
C2A C1A P1 Na1 159(3) . . . . ?
P1 C1A C2A C3A -165(4) . . . . ?
C1A C2A C3A O38B -16(9) . . . . ?
C1A C2A C3A O39A -157(4) . . . . ?
W4 O10 P3 O37 -113(2) . . . . ?
W4 O10 P3 O13 11(2) . . . . ?
W4 O10 P3 C7 123.8(18) . . . . ?
W5 O13 P3 O37 114.4(19) . . . . ?
W5 O13 P3 O10 -9(2) . . . . ?
W5 O13 P3 C7 -121.7(19) . . . . ?
O37 P3 C7 C8 -49(3) . . . . ?
O10 P3 C7 C8 74(3) . . . . ?
O13 P3 C7 C8 -172(3) . . . . ?
P3 C7 C8 C9 177(3) . . . . ?
C7 C8 C9 O43 4(6) . . . . ?
C7 C8 C9 O42 -179(3) . . . . ?
W2 O4 P2 O36 -125(2) . . . . ?
W2 O4 P2 O7 6(3) . . . . ?
W2 O4 P2 C4 120(3) . . . . ?
W3 O7 P2 O36 116(3) . . . . ?
W3 O7 P2 O4 -9(3) . . . . ?
W3 O7 P2 C4 -120(3) . . . . ?
O36 P2 C4 C5 91(6) . . . . ?
O4 P2 C4 C5 -152(5) . . . . ?
O7 P2 C4 C5 -40(6) . . . . ?
P2 C4 C5 C6 -175(5) . . . . ?
C4 C5 C6 O41 -35(12) . . . . ?
C4 C5 C6 O40 166(8) . . . . ?
C22 N1 C10 C11 -69(5) . . . . ?
C18 N1 C10 C11 171(5) . . . . ?
C14 N1 C10 C11 53(6) . . . . ?
N1 C10 C11 C12 -169(5) . . . . ?
C10 C11 C12 C13 -178(6) . . . . ?
C10 N1 C14 C15 55(6) . . . . ?
C22 N1 C14 C15 -177(5) . . . . ?
C18 N1 C14 C15 -59(6) . . . . ?
N1 C14 C15 C16 -172(6) . . . . ?
C14 C15 C16 C17 -175(6) . . . . ?
C10 N1 C18 C19 175(4) . . . . ?
C22 N1 C18 C19 50(5) . . . . ?
C14 N1 C18 C19 -65(5) . . . . ?
N1 C18 C19 C20 178(5) . . . . ?
C18 C19 C20 C21 -176(7) . . . . ?
C10 N1 C22 C23 -67(5) . . . . ?
C18 N1 C22 C23 50(5) . . . . ?
C14 N1 C22 C23 168(5) . . . . ?
N1 C22 C23 C24 169(5) . . . . ?
C22 C23 C24 C25 159(6) . . . . ?
C34 N2 C26 C27 67(7) . . . . ?
C30 N2 C26 C27 -56(7) . . . . ?
C38 N2 C26 C27 -173(6) . . . . ?
N2 C26 C27 C28 179(6) . . . . ?
C26 C27 C28 C29 -174(6) . . . . ?
C26 N2 C30 C31 -73(6) . . . . ?
C34 N2 C30 C31 158(5) . . . . ?
C38 N2 C30 C31 40(6) . . . . ?
N2 C30 C31 C32 103(9) . . . . ?
```

```
C30 C31 C32 C33 173(7) . . . . ?
C26 N2 C38 C39 -171(5) . . . . ?
C34 N2 C38 C39 -46(5) . . . . ?
C30 N2 C38 C39 70(5) . . . . ?
N2 C38 C39 C40 -148(5) . . . . ?
C38 C39 C40 C41 -90(8) . . . . ?
C26 N2 C34 C35 29(7) . . . . ?
C30 N2 C34 C35 155(6) . . . . ?
C38 N2 C34 C35 -88(7) . . . . ?
N2 C34 C35 C36 178(6) . . . . ?
C46 N3 C42 C43 -150(10) . . . . ?
C54 N3 C42 C43 -23(11) . . . . ?
C50 N3 C42 C43 94(10) . . . . ?
N3 C42 C43 C44 157(12) . . . . ?
C42 C43 C44 C45 173(13) . . . . ?
C42 N3 C46 C47 60(10) . . . . ?
C54 N3 C46 C47 -69(10) . . . . ?
C50 N3 C46 C47 176(10) . . . . ?
N3 C46 C47 C48 -73(12) . . . . ?
C46 C47 C48 C49 70(15) . . . . ?
C42 N3 C50 C51 161(6) . . . . ?
C46 N3 C50 C51 40(6) . . . . ?
C54 N3 C50 C51 -76(7) . . . . ?
N3 C50 C51 C52 84(7) . . . . ?
C50 C51 C52 C53 79(12) . . . . ?
C42 N3 C54 C55 50(6) . . . . ?
C46 N3 C54 C55 179(6) . . . . ?
C50 N3 C54 C55 -67(6) . . . . ?
N3 C54 C55 C56 59(12) . . . . ?
C54 C55 C56 C57 168(15) . . . . ?
O35 P1 O1 W1 135.1(17) . . . . ?
O16 P1 O1 W1 11(2) . . . . ?
C1A P1 O1 W1 -105(2) . . . . ?
Na1 P1 O1 W1 98.2(16) . . . . ?
O35 P1 O16 W6 -132.4(18) . . . . ?
O1 P1 O16 W6 -8(2) . . . . ?
C1A P1 O16 W6 107(2) . . . . ?
Na1 P1 O16 W6 -94.2(16) . . . . ?
O16 P1 O35 Na1 63.3(19) . . . . ?
O1 P1 O35 Na1 -60.1(18) . . . . ?
C1A P1 O35 Na1 -177.6(17) . . . . ?
O4 P2 O36 Na1 61(2) . . . . ?
O7 P2 O36 Na1 -61(2) . . . . ?
C4 P2 O36 Na1 174.7(18) . . . . ?
O10 P3 O37 Na1 63(2) . . . . ?
O13 P3 O37 Na1 -58(2) . . . . ?
C7 P3 O37 Na1 -178.0(18) . . . . ?
W3 O20 Si1 O19 -177.7(9) . . . . ?
W2 O20 Si1 O19 -48.6(13) . . . . ?
W3 O20 Si1 O21 51.2(13) . . . . ?
W2 O20 Si1 O21 -179.7(9) . . . . ?
W3 O20 Si1 O28 -63.8(12) . . . . ?
W2 O20 Si1 O28 65.3(11) . . . . ?
W1 O19 Si1 O20 48.7(13) . . . . ?
W6 O19 Si1 O20 -178.3(9) . . . . ?
W1 O19 Si1 O21 179.5(9) . . . . ?
W6 O19 Si1 O21 -47.5(12) . . . . ?
W1 O19 Si1 O28 -65.1(11) . . . . ?
W6 O19 Si1 O28 67.8(11) . . . . ?
W5 O21 Si1 O20 -179.2(9) . . . . ?
W4 O21 Si1 O20 -48.1(12) . . . . ?
W5 O21 Si1 O19 49.8(12) . . . . ?
W4 O21 Si1 O19 -179.1(8) . . . . ?
W5 O21 Si1 O28 -64.9(11) . . . . ?
W4 O21 Si1 O28 66.2(11) . . . . ?
W7 O28 Si1 O20 -61.3(11) . . . . ?
```

```
W8 O28 Si1 O20 62.2(11) . . . . ?
W9 O28 Si1 O20 -180.0(8) . . . . ?
W7 O28 Si1 O19 58.3(11) . . . . ?
W8 O28 Si1 O19 -178.2(9) . . . . ?
W9 O28 Si1 O19 -60.3(10) . . . . ?
W7 O28 Si1 O21 178.8(9) . . . . ?
W8 O28 Si1 O21 -57.6(11) . . . . ?
W9 O28 Si1 O21 60.2(11) . . . . ?
W7 O22 W1 O2 136(2) . . . . ?
W7 O22 W1 O3 35(2) . . . . ?
W7 O22 W1 O18 -123(2) . . . . ?
W7 O22 W1 O1 -42(5) . . . . ?
W7 O22 W1 O19 -49(2) . . . . ?
W2 O3 W1 O2 -119.5(18) . . . . ?
W2 O3 W1 O22 -18.9(18) . . . . ?
W2 O3 W1 O18 73(3) . . . . ?
W2 O3 W1 O1 146.2(18) . . . . ?
W2 O3 W1 O19 66.4(17) . . . . ?
W6 O18 W1 O2 -171.8(11) . . . . ?
W6 O18 W1 O22 87.2(10) . . . . ?
W6 O18 W1 O3 -4(3) . . . . ?
W6 O18 W1 O1 -77.7(11) . . . . ?
W6 O18 W1 O19 2.6(9) . . . . ?
P1 O1 W1 O2 123.6(18) . . . . ?
P1 O1 W1 O22 -58(4) . . . . ?
P1 O1 W1 O3 -135.7(17) . . . . ?
P1 O1 W1 O18 23.3(17) . . . . ?
P1 O1 W1 O19 -51.5(16) . . . . ?
Si1 O19 W1 O2 -170(6) . . . . ?
W6 O19 W1 O2 47(7) . . . . ?
Si1 O19 W1 O22 48.8(11) . . . . ?
W6 O19 W1 O22 -94.9(7) . . . . ?
Si1 O19 W1 O3 -40.9(11) . . . . ?
W6 O19 W1 O3 175.5(7) . . . . ?
Si1 O19 W1 O18 141.7(12) . . . . ?
W6 O19 W1 O18 -1.9(6) . . . . ?
Si1 O19 W1 O1 -129.4(12) . . . . ?
W6 O19 W1 O1 87.0(8) . . . . ?
W3 O6 W2 O5 173.4(17) . . . . ?
W3 O6 W2 O3 -1(4) . . . . ?
W3 O6 W2 O4 76.3(16) . . . . ?
W3 O6 W2 O23 -87.3(15) . . . . ?
W3 O6 W2 O20 -3.1(13) . . . . ?
W1 O3 W2 O5 116.4(19) . . . . ?
W1 O3 W2 O6 -70(4) . . . . ?
W1 O3 W2 O4 -145.9(18) . . . . ?
W1 O3 W2 O23 17.6(17) . . . . ?
W1 O3 W2 O20 -67.2(17) . . . . ?
P2 O4 W2 O5 -133(2) . . . . ?
P2 O4 W2 O6 -34(2) . . . . ?
P2 O4 W2 O3 126(2) . . . . ?
P2 O4 W2 O23 46(4) . . . . ?
P2 O4 W2 O20 41(2) . . . . ?
W7 O23 W2 O5 -136(2) . . . . ?
W7 O23 W2 O6 125(2) . . . . ?
W7 O23 W2 O3 -34(2) . . . . ?
W7 O23 W2 O4 46(4) . . . . ?
W7 O23 W2 O20 50(2) . . . . ?
Si1 O20 W2 O5 -170(10) . . . . ?
W3 O20 W2 O5 -28(10) . . . . ?
Si1 O20 W2 O6 -139.5(14) . . . . ?
W3 O20 W2 O6 2.3(10) . . . . ?
Si1 O20 W2 O3 41.4(11) . . . . ?
W3 O20 W2 O3 -176.8(7) . . . . ?
Si1 O20 W2 O4 131.8(13) . . . . ?
W3 O20 W2 O4 -86.4(8) . . . . ?
```

```
Si1 O20 W2 O23 -46.9(11) . . . . ?
W3 O20 W2 O23 94.9(7) . . . . ?
P2 O7 W3 O8 137(3) . . . . ?
P2 O7 W3 O9 -122(3) . . . . ?
P2 O7 W3 O6 37(3) . . . . ?
P2 O7 W3 O20 -38(2) . . . . ?
P2 O7 W3 O24 -43(5) . . . . ?
W4 O9 W3 O8 -119(2) . . . . ?
W4 O9 W3 O7 145.1(19) . . . . ?
W4 O9 W3 O6 71(4) . . . . ?
W4 O9 W3 O20 65.4(17) . . . . ?
W4 O9 W3 O24 -17.6(17) . . . . ?
W2 O6 W3 O8 -172.3(18) . . . . ?
W2 O6 W3 O7 -77.4(17) . . . . ?
W2 O6 W3 O9 -2(4) . . . . ?
W2 O6 W3 O20 3.1(13) . . . . ?
W2 O6 W3 O24 85.2(15) . . . . ?
Si1 O20 W3 O8 179(100) . . . . ?
W2 O20 W3 O8 38(10) . . . . ?
Si1 O20 W3 O7 -133.2(14) . . . . ?
W2 O20 W3 O7 85.7(9) . . . . ?
Si1 O20 W3 O9 -43.2(12) . . . . ?
W2 O20 W3 O9 175.7(7) . . . . ?
Si1 O20 W3 O6 138.8(15) . . . . ?
W2 O20 W3 O6 -2.3(10) . . . . ?
Si1 O20 W3 O24 45.3(11) . . . . ?
W2 O20 W3 O24 -95.8(7) . . . . ?
W8 O24 W3 O8 127(2) . . . . ?
W8 O24 W3 O7 -53(4) . . . . ?
W8 O24 W3 O9 26(2) . . . . ?
W8 O24 W3 O6 -132(2) . . . . ?
W8 O24 W3 O20 -58(2) . . . . ?
W8 O25 W4 O11 -134(2) . . . . ?
W8 O25 W4 O9 -34(2) . . . . ?
W8 O25 W4 O12 125(2) . . . . ?
W8 O25 W4 O10 60(5) . . . . ?
W8 O25 W4 O21 51(2) . . . . ?
W3 O9 W4 O11 120.8(19) . . . . ?
W3 O9 W4 O25 21.0(18) . . . . ?
W3 O9 W4 O12 -62(3) . . . . ?
W3 O9 W4 O10 -144.2(18) . . . . ?
W3 O9 W4 O21 -64.6(17) . . . . ?
W5 O12 W4 O11 170.9(13) . . . . ?
W5 O12 W4 O25 -89.5(12) . . . . ?
W5 O12 W4 O9 -6(3) . . . . ?
W5 O12 W4 O10 77.1(12) . . . . ?
W5 O12 W4 O21 -3.7(10) . . . . ?
P3 O10 W4 O11 -138.0(19) . . . . ?
P3 O10 W4 O25 27(5) . . . . ?
P3 O10 W4 O9 121.6(18) . . . . ?
P3 O10 W4 O12 -37.8(18) . . . . ?
P3 O10 W4 O21 36.7(17) . . . . ?
Si1 O21 W4 O11 175(7) . . . . ?
W5 O21 W4 O11 -42(7) . . . . ?
Si1 O21 W4 O25 -50.8(11) . . . . ?
W5 O21 W4 O25 92.3(7) . . . . ?
Si1 O21 W4 O9 38.9(11) . . . . ?
W5 O21 W4 O9 -178.0(7) . . . . ?
Si1 O21 W4 O12 -140.3(12) . . . . ?
W5 O21 W4 O12 2.8(7) . . . . ?
Si1 O21 W4 O10 131.6(12) . . . . ?
W5 O21 W4 O10 -85.3(8) . . . . ?
W6 O15 W5 O14 -121(2) . . . . ?
W6 O15 W5 O12 70(3) . . . . ?
W6 O15 W5 O26 -20.9(18) . . . . ?
W6 O15 W5 O13 145.8(19) . . . . ?
```

```
W6 O15 W5 O21 65.3(18) . . . . ?
W4 O12 W5 O14 -169.8(14) . . . . ?
W4 O12 W5 O15 -1(3) . . . . ?
W4 O12 W5 O26 89.4(12) . . . . ?
W4 O12 W5 O13 -77.0(12) . . . . ?
W4 O12 W5 O21 3.7(10) . . . . ?
W9 O26 W5 O14 136(2) . . . . ?
W9 O26 W5 O15 35(2) . . . . ?
W9 O26 W5 O12 -124(2) . . . . ?
W9 O26 W5 O13 -42(5) . . . . ?
W9 O26 W5 O21 -49(2) . . . . ?
P3 O13 W5 O14 135.6(18) . . . . ?
P3 O13 W5 O15 -123.3(17) . . . . ?
P3 O13 W5 O12 36.4(17) . . . . ?
P3 O13 W5 O26 -46(4) . . . . ?
P3 O13 W5 O21 -38.9(16) . . . . ?
Si1 O21 W5 O14 -172(7) . . . . ?
W4 O21 W5 O14 46(8) . . . . ?
Si1 O21 W5 O15 -42.1(11) . . . . ?
W4 O21 W5 O15 175.5(7) . . . . ?
Si1 O21 W5 O12 139.6(12) . . . . ?
W4 O21 W5 O12 -2.9(7) . . . . ?
Si1 O21 W5 O26 47.4(11) . . . . ?
W4 O21 W5 O26 -95.1(7) . . . . ?
Si1 O21 W5 O13 -130.9(12) . . . . ?
W4 O21 W5 O13 86.6(7) . . . . ?
W1 O18 W6 O17 172.1(13) . . . . ?
W1 O18 W6 O27 -87.5(10) . . . . ?
W1 O18 W6 O15 4(3) . . . . ?
W1 O18 W6 O16 78.3(11) . . . . ?
W1 O18 W6 O19 -2.5(9) . . . . ?
W9 O27 W6 O17 -134.0(19) . . . . ?
W9 O27 W6 O18 127.9(19) . . . . ?
W9 O27 W6 O15 -32.0(19) . . . . ?
W9 O27 W6 O16 61(4) . . . . ?
W9 O27 W6 O19 53.4(18) . . . . ?
W5 O15 W6 O17 121(2) . . . . ?
W5 O15 W6 O18 -71(3) . . . . ?
W5 O15 W6 O27 20.4(18) . . . . ?
W5 O15 W6 O16 -144.3(19) . . . . ?
W5 O15 W6 O19 -64.8(18) . . . . ?
P1 O16 W6 O17 -126.0(18) . . . . ?
P1 O16 W6 O18 -28.5(17) . . . . ?
P1 O16 W6 O27 39(4) . . . . ?
P1 O16 W6 O15 132.2(18) . . . . ?
P1 O16 W6 O19 46.9(17) . . . . ?
Si1 O19 W6 O17 -178(59) . . . . ?
W1 O19 W6 O17 -34(6) . . . . ?
Si1 O19 W6 O18 -142.9(12) . . . . ?
W1 O19 W6 O18 2.0(7) . . . . ?
Si1 O19 W6 O27 -51.4(10) . . . . ?
W1 O19 W6 O27 93.5(6) . . . . ?
Si1 O19 W6 O15 39.2(11) . . . . ?
W1 O19 W6 O15 -175.9(7) . . . . ?
Si1 O19 W6 O16 130.6(11) . . . . ?
W1 O19 W6 O16 -84.6(7) . . . . ?
W2 O23 W7 O30 139(2) . . . . ?
W2 O23 W7 O31 -122(2) . . . . ?
W2 O23 W7 O29 -33(4) . . . . ?
W2 O23 W7 O22 38(2) . . . . ?
W2 O23 W7 O28 -49(2) . . . . ?
W8 O31 W7 O30 -172.9(16) . . . . ?
W8 O31 W7 O23 86.7(14) . . . . ?
W8 O31 W7 O29 -72.0(14) . . . . ?
W8 O31 W7 O22 13(4) . . . . ?
W8 O31 W7 O28 1.8(12) . . . . ?
```

```
W9 O29 W7 O30 169.6(12) . . . . ?
W9 O29 W7 O23 -19(3) . . . . ?
W9 O29 W7 O31 70.6(12) . . . . ?
W9 O29 W7 O22 -88.1(11) . . . . ?
W9 O29 W7 O28 -2.4(9) . . . . ?
W1 O22 W7 O30 -138(2) . . . . ?
W1 O22 W7 O23 -39(2) . . . . ?
W1 O22 W7 O31 36(4) . . . . ?
W1 O22 W7 O29 121(2) . . . . ?
W1 O22 W7 O28 47(2) . . . . ?
Si1 O28 W7 O30 170(6) . . . . ?
W8 O28 W7 O30 34(7) . . . . ?
W9 O28 W7 O30 -57(7) . . . . ?
Si1 O28 W7 O23 42.9(11) . . . . ?
W8 O28 W7 O23 -93.9(7) . . . . ?
W9 O28 W7 O23 175.7(7) . . . . ?
Si1 O28 W7 O31 135.5(13) . . . . ?
W8 O28 W7 O31 -1.3(8) . . . . ?
W9 O28 W7 O31 -91.6(9) . . . . ?
Si1 O28 W7 O29 -131.2(11) . . . . ?
W8 O28 W7 O29 92.0(7) . . . . ?
W9 O28 W7 O29 1.7(6) . . . . ?
Si1 O28 W7 O22 -40.4(10) . . . . ?
W8 O28 W7 O22 -177.2(7) . . . . ?
W9 O28 W7 O22 92.5(6) . . . . ?
W3 O24 W8 O32 -130(2) . . . . ?
W3 O24 W8 O31 131(2) . . . . ?
W3 O24 W8 O33 58(4) . . . . ?
W3 O24 W8 O25 -29(2) . . . . ?
W3 O24 W8 O28 57.5(19) . . . . ?
W7 O31 W8 O24 -87.2(14) . . . . ?
W7 O31 W8 O32 170.4(16) . . . . ?
W7 O31 W8 O33 73.1(14) . . . . ?
W7 O31 W8 O25 -18(4) . . . . ?
W7 O31 W8 O28 -1.8(12) . . . . ?
W9 O33 W8 O24 0(4) . . . . ?
W9 O33 W8 O32 -172.1(15) . . . . ?
W9 O33 W8 O31 -72.3(13) . . . . ?
W9 O33 W8 O25 86.4(13) . . . . ?
W9 O33 W8 O28 0.8(11) . . . . ?
W4 O25 W8 O24 37(2) . . . . ?
W4 O25 W8 O32 139(2) . . . . ?
W4 O25 W8 O31 -32(4) . . . . ?
W4 O25 W8 O33 -123(2) . . . . ?
W4 O25 W8 O28 -48(2) . . . . ?
Si1 O28 W8 O24 -48.3(12) . . . . ?
W7 O28 W8 O24 88.5(8) . . . . ?
W9 O28 W8 O24 179.2(8) . . . . ?
Si1 O28 W8 O32 175(6) . . . . ?
W7 O28 W8 O32 -48(6) . . . . ?
W9 O28 W8 O32 43(6) . . . . ?
Si1 O28 W8 O31 -135.5(13) . . . . ?
W7 O28 W8 O31 1.3(8) . . . . ?
W9 O28 W8 O31 92.1(9) . . . . ?
Si1 O28 W8 O33 131.8(12) . . . . ?
W7 O28 W8 O33 -91.4(8) . . . . ?
W9 O28 W8 O33 -0.6(8) . . . . ?
Si1 O28 W8 O25 38.7(11) . . . . ?
W7 O28 W8 O25 175.5(7) . . . . ?
W9 O28 W8 O25 -93.7(7) . . . . ?
W7 O29 W9 O34 -170.3(13) . . . . ?
W7 O29 W9 O33 -72.1(12) . . . . ?
W7 O29 W9 O27 88.5(11) . . . . ?
W7 O29 W9 O26 18(3) . . . . ?
W7 O29 W9 O28 2.4(9) . . . . ?
W8 O33 W9 O34 172.1(14) . . . . ?
```

```
W8 O33 W9 O29 73.2(13) . . . . ?
W8 O33 W9 O27 -16(4) . . . . ?
W8 O33 W9 O26 -87.0(13) . . . . ?
W8 O33 W9 O28 -0.8(11) . . . . ?
W6 O27 W9 O34 135(2) . . . . ?
W6 O27 W9 O29 -126.0(19) . . . . ?
W6 O27 W9 O33 -37(4) . . . . ?
W6 O27 W9 O26 35.3(19) . . . . ?
W6 O27 W9 O28 -51.2(18) . . . . ?
W5 O26 W9 O34 -138(2) . . . . ?
W5 O26 W9 O29 34(4) . . . . ?
W5 O26 W9 O33 124(2) . . . . ?
W5 O26 W9 O27 -38(2) . . . . ?
W5 O26 W9 O28 48(2) . . . . ?
Si1 O28 W9 O34 -179(100) . . . . ?
W7 O28 W9 O34 47(5) . . . . ?
W8 O28 W9 O34 -46(5) . . . . ?
Si1 O28 W9 O29 132.2(11) . . . . ?
W7 O28 W9 O29 -1.7(7) . . . . ?
W8 O28 W9 O29 -94.3(7) . . . . ?
Si1 O28 W9 O33 -132.9(12) . . . . ?
W7 O28 W9 O33 93.2(8) . . . . ?
W8 O28 W9 O33 0.6(8) . . . . ?
Si1 O28 W9 O27 42.2(10) . . . . ?
W7 O28 W9 O27 -91.7(6) . . . . ?
W8 O28 W9 O27 175.7(6) . . . . ?
Si1 O28 W9 O26 -42.6(10) . . . . ?
W7 O28 W9 O26 -176.6(7) . . . . ?
W8 O28 W9 O26 90.9(7) . . . . ?
P3 O37 Na1 O36 -101(2) . . . . ?
P3 O37 Na1 O35 107(2) . . . . ?
P3 O37 Na1 P1 80(2) . . . . ?
P2 O36 Na1 O37 101(2) . . . . ?
P2 O36 Na1 O35 -108(2) . . . . ?
P2 O36 Na1 P1 -80(2) . . . . ?
P1 O35 Na1 O37 -106.5(19) . . . . ?
P1 O35 Na1 O36 105(2) . . . . ?
O35 P1 Na1 O37 87(2) . . . . ?
O16 P1 Na1 O37 -36.3(14) . . . . ?
O1 P1 Na1 O37 -146.2(14) . . . . ?
C1A P1 Na1 O37 92(3) . . . . ?
O35 P1 Na1 O36 -91(2) . . . . ?
O16 P1 Na1 O36 145.2(14) . . . . ?
O1 P1 Na1 O36 35.4(14) . . . . ?
C1A P1 Na1 O36 -86(3) . . . . ?
O16 P1 Na1 O35 -124(2) . . . . ?
O1 P1 Na1 O35 126(2) . . . . ?
C1A P1 Na1 O35 5(4) . . . . ?
C34 C35 C36 C37 -152(8) . . . . ?

_diffrn_measured_fraction_theta_max    0.988
_diffrn_reflns_theta_full              56.21
_diffrn_measured_fraction_theta_full   0.988
_refine_diff_density_max    3.555
_refine_diff_density_min   -2.559
_refine_diff_density_rms    0.257
```